



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO DE CIÊNCIAS AGRÁRIAS E ENGENHARIAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**CONTROLE DE UM REATOR DE POLIMERIZAÇÃO DE PROPENO UTILIZANDO
FILTRO DE PARTÍCULAS E REDE NEURAL**

ANA CAROLINA SPINDOLA RANGEL DIAS

ALEGRE, ES

2017

Ana Carolina Spindola Rangel Dias

**CONTROLE DE UM REATOR DE POLIMERIZAÇÃO DE PROPENO UTILIZANDO
FILTRO DE PARTÍCULAS E REDE NEURAL**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química do Centro de Ciências Agrárias e Engenharias da Universidade Federal do Espírito Santo, como parte das exigências para obtenção do Título de Mestre em Engenharia Química.

Área de Concentração: Engenharia Química

Linha de Pesquisa: Modelagem, Otimização e Análise de Processos

Orientador: Prof. D.Sc. Julio Cesar Sampaio Dutra

Coorientador: Prof. D.Sc. Wellington Betencurte da Silva

ALEGRE, ES

Fevereiro de 2017

Dados Internacionais de Catalogação-na-publicação (CIP)
(Biblioteca Setorial de Ciências Agrárias, Universidade Federal do Espírito Santo, ES, Brasil)

D541c Dias, Ana Carolina Spindola Rangel, 1991-
 Controle de um reator de polimerização de propeno utilizando filtro
 de partículas e rede neural / Ana Carolina Spindola Rangel Dias. – 2017.
 121 f. : il.

Orientador: Júlio Cesar Sampaio Dutra.

Coorientador: Wellington Betencurte da Silva.

Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade
Federal do Espírito Santo, Centro de Ciências Agrárias e Engenharias.

1. Modelagem. 2. Simulação. 3. Estimação de estados. 4. Filtro de
partículas. 5. Redes neurais (Computação). 6. Controle de processo. 7.
Polimerização. I. Dutra, Júlio Cesar Sampaio. II. Silva, Wellington
Betencurte da. III. Universidade Federal do Espírito Santo. Centro de
Ciências Agrárias e Engenharias. IV. Título.

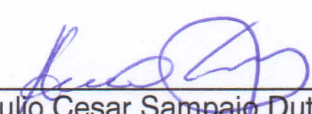
CDU: 66.0

**CONTROLE DE UM REATOR DE POLIMERIZAÇÃO DE PROPENO UTILIZANDO
FILTRO DE PARTÍCULAS E REDE NEURAL**

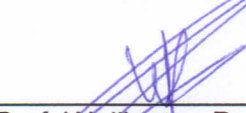
ANA CAROLINA SPINDOLA RANGEL DIAS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química do Centro de Ciências Agrárias e Engenharias da Universidade Federal do Espírito Santo, como parte das exigências para obtenção do Título de Mestre em Engenharia Química.

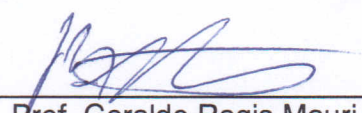
Aprovada em 15 de fevereiro de 2017:




Prof. Julio Cesar Sampaio Dutra, DSc.
Universidade Federal do Espírito Santo



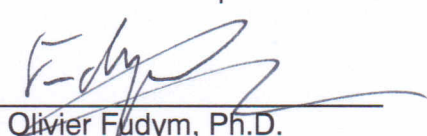
Prof. Wellington Betencurte da Silva, DSc.
Universidade Federal do Espírito Santo



Prof. Geraldo Regis Mauri, DSc.
Universidade Federal do Espírito Santo



Prof. Icaro Pianca Guidolini, DSc.
Universidade Federal do Espírito Santo



Prof. Olivier Fudym, Ph.D.
Centro Nacional de Pesquisas Científicas - CNRS

*A Ailton e Fátima, meus pais,
a Felipe e Ana Clara, meus irmãos,
pelo apoio incondicional, carinho e amor*

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Universidade Federal do Espírito Santo pelo apoio logístico na execução dos trabalhos realizados.

Agradeço, de maneira muito especial, aos professores Julio Cesar Sampaio Dutra e Wellington Betencurte da Silva, que me orientaram neste trabalho, com muita dedicação e paciência. Incentivaram-me desde o princípio, me fizeram crescer como pessoa e como pesquisadora, trazendo-me valiosos conselhos que levarei comigo sempre.

Agradeço os meus amigos pela amizade e companheirismo nos momentos de ausência e dificuldade. Em especial os companheiros do MOP, pelas discussões calorosas, pelo apoio e pelas horas do doce no Robson.

Agradeço ao Criador que sempre iluminou meu caminho e a minha família, principalmente meus pais, Ailton e Fátima, e meus irmãos, Ana Clara e Luis Felipe, por entenderem minha ausência mesmo quando eu estava por perto, por acreditarem em mim quando eu mesma não acreditava, por me mostrarem a luz quando eu só enxergava as dificuldades e por todo amor, carinho e apoio incondicional.

RESUMO

DIAS, Ana Carolina Spindola Rangel. **Controle de um reator de polimerização de propeno utilizando filtro de partículas e rede neural**. 2017. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal do Espírito Santo, Alegre, ES. Orientador: Julio Cesar Sampaio Dutra. Coorientador: Wellington Betencurte da Silva.

Os materiais poliméricos estão presentes em diversos setores industriais e na vida diária da sociedade, apresentando vantagens como menores custos e maior durabilidade. O polipropileno, obtido pela formação de longas cadeias de monômero de propeno, é uma das oleofinas mais importantes da atualidade, possuindo ampla gama de aplicações. Devido ao forte interesse econômico que desperta, existe uma busca contínua por melhorias em seu processo produtivo. Vários métodos para sua fabricação podem ser encontrados, combinando tecnologias de produção e de catalizadores. Para garantir a segurança, as necessidades e atingir os objetivos das operações, torna-se necessário inserir estruturas para um controle eficaz do processo. Entretanto, sem um bom monitoramento, isto não é possível. Em plantas reais de polimerização, os dispositivos de medição estão sujeitos a incertezas e nem sempre estão disponíveis; ou o equipamento de fato não existe ou seu custo de obtenção/manutenção torna seu uso inviável. Assim, esta dissertação propõe um esquema de sensor virtual baseado em filtro de partículas (FP) e rede neural artificial (RNA), que é aplicado a um reator de polimerização de propeno simulado. Este esquema permite a redução da incerteza e a observação de variáveis latentes por meio do FP. Na sequência, a RNA permite a detecção de propriedades finais do polipropileno a partir dos dados melhorados. O intuito é fornecer aos controladores informações mais completas e melhoradas. Os resultados mostraram que o sensor virtual possibilitou melhorias no controle do processo, fornecendo estimativas precisas e tempo de ação consistente com intervalos de amostragens industriais, o que destaca seu potencial para aplicação prática.

Palavras-chave: Modelagem e Simulação, Estimação de Estados, Filtro de Partículas, Rede Neural, Controle de Processos, Polimerização.

ABSTRACT

DIAS, Ana Carolina Spindola Rangel. **Propylene polymerization reactor control through particle filter and neural network** 2017. Dissertation (Master Degree in Chemical Engineering) –Espírito Santo Federal University, Alegre, ES. Adviser: Julio Cesar Sampaio Dutra. Co-adviser: Wellington Betencurte da Silva.

Polymeric materials are present in several industrial sectors and in the society daily life, presenting advantages such as lower costs and higher durability. Polypropylene, obtained by the formation of propylene monomer long chains, is one of the most important olefins today, having a wide range of applications. Due to strong economic interest it arouses, there is a continuous search for improvements in its production process. Several methods for its obtaining it can be found by combining production technologies and catalysts. To ensure safety and achieve the operations objectives, it becomes necessary to insert structures for the process effective control. However, without a quality monitoring, this is not possible. In actual polymerization plants, the measuring devices are subject to uncertainties and are not always available; or the equipment does not exist or its purchase/maintenance cost makes its use unfeasible. Thus, this work proposes a virtual sensor scheme based on particle filter (PF) and artificial neural network (ANN), which is applied to a simulated propylene polymerization reactor. This structure allows the uncertainty reduction and the latent variables observation by means of PF. In turn, the ANN detects the polypropylene final properties from the improved data. The concern was to provide controllers with more complete and improved information. The results showed that the virtual sensor allowed improvements in process control, providing accurate estimates and consistent action time with industrial sampling intervals, which highlights its potential for practical application.

Keywords: Modeling and Simulation, State Estimation, Particle Filter, Neural Network, Process Control, Polymerization.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Esquema simplificado do processo Spheripol. Fonte: REGINATO (2001).	28
Figura 2 - Processo de produção de polipropileno em fase líquida. Fonte: REGINATO (2001). Modificado pelo autor.	29
Figura 3 - Diagrama esquemático da abordagem <i>in-line</i> para monitoramento. Fonte: HERGETH (1999). Modificado pelo autor.	33
Figura 4 - Diagrama esquemático da abordagem <i>on-line</i> para monitoramento. Fonte: HERGETH (1999). Modificado pelo autor.	33
Figura 5 - Diagrama esquemático da abordagem <i>off-line</i> para monitoramento. Fonte: HERGETH (1999). Modificado pelo autor.	34
Figura 6 - Esquema simplificado da atualização do filtro de Kalman como preditor- corretor. Fonte: DUARTE (2007). Modificado pelo autor.....	42
Figura 7 - Esquema simplificado do filtro de partículas SIR.	46
Figura 8 - Esquema simplificado de um neurônio artificial. Fonte: PROTTE, 2009. Modificado pelo autor.	50
Figura 9 - Diagrama simplificado de uma rede neural artificial. Fonte: PIMENTEL (2005). Modificado pelo autor.....	51
Figura 10 - Estrutura simplificada de redes <i>feedforward</i>	51
Figura 11 - Estrutura simplificada de redes <i>feedback</i>	52
Figura 12 - Fluxograma simplificado do processo.	58
Figura 13 - Representação esquemática do sistema de controle feedback baseado em sensores virtuais.	67
Figura 14 - Distribuição dos dados padrões normalizados: A) Índice de Fluides; e B) Teor de Solúveis em Xileno.....	69

Figura 15 - Comparação entre os valores estimados e padrão para a rede de melhor desempenho.....	71
Figura 16 - Comparação da temperatura do reator e taxa de condensação para os modelos rigoroso e simplificado.	72
Figura 17 - Comparação do volume do reator e da vazão de saída de lama para os modelos rigoroso e simplificado.	73
Figura 18 - Comparação do índice de fluidez e da vazão de alimentação de hidrogênio para os modelos rigoroso e simplificado.....	73
Figura 19 - Comparação do teor de solúveis em xileno e da razão de alimentação de TEA e PEEB para os modelos rigoroso e simplificado.....	74
Figura 20 - Comportamento dinâmico diante de um teste do regulador para a temperatura do reator e vazão de monômero do condensado.....	75
Figura 21 - Comportamento dinâmico diante de um teste do regulador para o volume do reator e vazão de saída de lama.	76
Figura 22 - Comportamento dinâmico diante de um teste do regulador para o índice de fluidez e vazão de alimentação de hidrogênio.....	76
Figura 23 - Histogramas de frequência para o tamanho efetivo de amostra considerando 10 e 50 partículas.	79
Figura 24 - Histogramas de frequência para o tamanho efetivo de amostra considerando 100 e 200 partículas.	80
Figura 25 - Resposta dinâmica para os testes de desempenho: (A) Temperatura do reator e taxa de condensação; (B) Volume do reator e vazão de saída de lama.	83
Figura 26 - Valor estimado e respectiva manipulação para o loop de controle do (A) índice de fluidez; e (B) teor de solúveis em xileno.	84

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Parâmetros de treinamento das redes <i>Perceptron</i> Multicamadas.....	64
Tabela 2 - Funções de ativação testadas para as camadas oculta e de saída.	65
Tabela 3 - Desempenho das melhores redes testadas.	70
Tabela 4 - Tamanho efetivo da amostra de acordo com os números de partículas e níveis de incerteza do filtro SIR.....	78
Tabela 5 - Largura máxima do intervalo de credibilidade.....	81

LISTA DE SÍGLAS

Sigla	Descrição
CSTR	Reator Contínuo de Tanque Agitado
EKF	Filtro de Kalman Estendido
ELM	Máquinas de Aprendizagem Extrema
EnKF	<i>Ensemble Kalman Filter</i>
FP	Filtro de Partículas
KF	Filtro de Kalman
LAMCES	Grupo de pesquisa em Métodos Computacionais, Controle e Estimação.
LIPP	<i>Liquid Pool Polymerization</i>
MI	Índice de Fluidez
MLP	Redes <i>Perceptron</i> Multicamadas
NDF	Métodos de Diferenciação Numéricos
PE	Polietileno
PEEB	Para-etox-etil benzoato
PET	Tereftalato de Polietileno
PLS	Regressão por Mínimos Quadrados Parciais
PP	Polipropileno
PVC	Policloreto de Vinila
RBF-NN	Redes Neurais com Funções de Ativação de Base Radial
RNA	Rede Neural Artificial
SIR	Amostragem por Importância e Reamostragem Sequencial
SVM	Máquina de Vetores de Suporte
TEA	Trietilalumínio
UFES	Universidade Federal do Espírito Santo
UKF	<i>Unscented Kalman Filter</i>
XS	Teor de Solúveis em Xileno
ZN	Ziegler Natta

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Descrição	[Unidades]
a_1	Constante da equação do índice de fluidez	-
a_2	Constante da equação do índice de fluidez	-
Cat	Concentração das espécies catalíticas no reator	$[mol/m^3]$
$c_{p,M}$	Calor específico do monômero	$[cal \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}]$
$c_{p,Pol}$	Calor específico do polímero	$[cal \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}]$
f	Modelo de evolução dos estados	-
h	Função de evolução das medidas (observação)	-
H_2	Concentração de hidrogênio no reator	$[mol/m^3]$
k	Instante de tempo	-
k_d	Constante cinética de desativação do catalisador	$[h^{-1}]$
k_p	Constante cinética de propagação de cadeia	$[L \cdot mol^{-1} \cdot h^{-1}]$
$k_{t,H}$	Constante cinética de transferência de cadeia por hidrogênio	$[L \cdot mol^{-1} \cdot h^{-1}]$
L_{inf}	Limite de credibilidade inferior	
L_{sup}	Limite de credibilidade superior	-
M	Concentração de monômero no reator	$[mol/m^3]$
M_c	Massa de monômero no condensador	$[kg]$
\dot{m}_{Cat}	Vazão de alimentação de catalisador	$[mol/h]$
\dot{m}_{Comb}	Vazão de alimentação do reator	$[kg/h]$
M_{cW}	Massa de água no condensador	$[kg]$
\dot{m}_H	Vazão de alimentação de hidrogênio	$[kg/h]$
MI	Índice de fluidez	$[g \cdot (10min)^{-1}]$
\dot{m}_M	Vazão de alimentação de monômero fresco	$[kg/h]$
M_n	Peso molecular médio numérico	$[kg/mol]$
\dot{m}_{M_c}	Vazão de saída de monômero do condensador	$[kg/h]$
\dot{m}_{PEEB}	Vazão de alimentação de PEEB	$[kg/h]$

Símbolo	Descrição	[Unidades]
\dot{m}_{Pol}	Vazão de saída de polímero	[kg/h]
\dot{m}_{Rec}	Vazão de monômero reciclado	[kg/h]
\dot{m}_s	Vazão de saída de lama do reator	[kg/h]
\dot{m}_{TEA}	Vazão de alimentação de TEA	[kg/h]
\dot{m}_W	Vazão de água de resfriamento utilizada no condensador	[kg/h]
M_W	Peso molecular médio mássico	[kg/mol]
n	Número de dados experimentais disponíveis	-
N_{eff}	Tamanho efetivo da amostra	-
$N_{n,i}$	Variável normalizada do conjunto padrão i da rede	-
\mathbf{p}	Vetor de parâmetros	-
$PEEB$	Massa de PEEB no reator	[kg]
PD	Índice de polidispersão	-
PM_H	Peso molar do hidrogênio	[kg/mol]
PM_M	Peso molar do monômero	[kg/mol]
Pol	Massa de polímero no reator	[kg]
Q_1	Quantidade de calor total retirada pelo condensador	[cal/h]
Q_2	Quantidade de calor total retirada pela camisa de refrigeração	[cal/h]
R_{Pol}	Taxa de polimerização	[kg/h]
T	Temperatura do reator	[K]
T_c	Temperatura do condensador	[K]
T_e	Temperatura de alimentação de monômero	[K]
TEA	Massa de TEA no reator	[kg]
T_W	Temperatura de saída de água do condensador	[K]
UA	Coeficiente global de transferência de calor	[cal · K ⁻¹ · h ⁻¹]
V	Volume do reator	[m ³]
\mathbf{w}	Vetor de ruídos do processo	-
W_M	Fração mássica de monômero no reator	-
W_{Pol}	Fração mássica de polímero no reator	-

Símbolo	Descrição	[Unidades]
\mathbf{x}	Vetor de estados	-
x_{exa}	Valor exato do padrão de entrada da rede	-
x_i	Variável do conjunto padrão i da rede	-
x_{\min}	Valor máximo do conjunto padrão i da rede	-
x_{\min}	Valor mínimo do conjunto padrão i da rede	-
x_{nom}	Valor nominal do padrão de entrada da rede	-
XS	Teor de solúveis em xileno	$[\%p/p]$
XS_R	Parâmetro adicional para o cálculo de XS	$[\%p/p]$
\mathbf{y}	Vetor de medidas	-
y_{exa}	Valor exato previsto pelo modelo rigoroso	-
$Y(\mathbf{x})$	Vetor com a solução do problema direto	-
ΔH	Calor de reação	$[cal/kg]$
Δu_k	Ação de controle	
λ_0	Momento de ordem 0 de uma distribuição de tamanhos de cadeia de um polímero vivo	$[mol/m^3]$
λ_1	Momento de ordem 1 de uma distribuição de tamanhos de cadeia de um polímero vivo	$[mol/m^3]$
λ_2	Momento de ordem 2 de uma distribuição de tamanhos de cadeia de um polímero vivo	$[mol/m^3]$
λ_M	Calor latente de vaporização do monômero	$[cal/h]$
$\boldsymbol{\mu}$	Vetor de variáveis de entrada	-
μ_k	Momento de ordem k de uma distribuição de tamanhos de cadeia de um polímero morto	$[mol/m^3]$
\mathbf{v}	Vetor de ruídos de medidas	-
$\pi_{posteriori}(\mathbf{x})$	Distribuição a posteriori de \mathbf{x}	-
$\pi(\mathbf{x}_k)$	Distribuição a priori de \mathbf{x}	-
$\pi(\mathbf{x}_k \mathbf{y}_0, \dots, \mathbf{y}_k)$	Distribuição condicional de \mathbf{x} dado \mathbf{y}	-
$\pi(\mathbf{y}_0, \dots, \mathbf{y}_k \mathbf{x}_k)$	Função de verossimilhança	-
$\pi(\mathbf{y}_0, \dots, \mathbf{y}_k)$	Distribuição de probabilidade marginal das medições	-
ρ	Densidade do meio reacional	$[kg/m^3]$
ρ_M	Densidade do monômero	$[kg/m^3]$

Símbolo	Descrição	[Unidades]
ρ_{Pol}	Densidade do polímero	$[kg/m^3]$
σ_{est}	Incerteza das partículas.	-
σ_{Part}	Incerteza para a evolução dos estados	

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	19
1.1.	Apresentação do tema de pesquisa	19
1.2.	Objetivos	20
1.3.	Trabalhos preliminares.....	21
1.4.	Organização do texto	22
2	POLIPROPILENO	24
2.1.	Breve histórico	24
2.2.	Cenário econômico	25
2.3.	Métodos de polimerização	26
2.4.	Tecnologias de produção	27
2.5.	Comentários finais.....	31
3	MONITORAMENTO DE PROCESSOS.....	32
3.1.	Limitação dos instrumentos de medida	34
3.2.	Sensores virtuais.....	35
3.3.	As ferramentas inferenciais e a estimação.....	36
3.4.	Aplicações dos sensores inferenciais em sistemas de polimerização	37
3.5.	Comentários finais.....	38
4	METODOS BAYESIANOS	40
4.1.	Filtros de Kalman	41
4.2.	Filtros de Partícula	44
4.3.	Comentários finais.....	47
5	REDES NEURAIS ARTIFICIAIS	49
5.1.	Redes Neurais Artificiais: Conceitos fundamentais	49
5.2.	Redes <i>Perceptron</i> Multicamadas	53
5.3.	Aplicações em sistemas de polimerização	54
5.4.	Comentários finais.....	55
6	METODOLOGIA.....	56
6.1.	Definição do modelo rigoroso.....	57
6.2.	Simplificação do modelo	62
6.3.	Implementação do filtro de partículas <i>on-line</i>	65
7	RESULTADOS E DISCUSSÃO	69
7.1.	Simplificação do modelo	69
7.2.	Efeito das incertezas de medição	74
7.3.	Esquema de controle com o sensor virtual associado	77
8	CONCLUSÕES E SUGESTÕES.....	86

9	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	88
	APÊNDICES	103
	Apêndice A – Artigo apresentado no XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química, em Fortaleza (DIAS <i>et al.</i> , 2016 ^a)	104
	Apêndice B – Artigo apresentado no XIX Encontro Nacional de Modelagem Computacional, em João Pessoa (CARVALHO <i>et al.</i> , 2016)	113

1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo, uma breve introdução sobre o presente trabalho é apresentada, incluindo a motivação da pesquisa e os principais objetivos, de modo a fornecer uma visão geral desta dissertação. Por fim, segue uma descrição da estrutura de organização do texto e dos artigos gerados ao longo deste estudo.

1.1. Apresentação do tema de pesquisa

Os materiais poliméricos estão presentes em vários setores industriais e no cotidiano da sociedade contemporânea. Substituem materiais tradicionais, tais como metais, apresentando vantagens como resistência à corrosão, menor peso, maleabilidade, menores custos, etc. (SCHORK; DESHPANDE; LEFFEW, 1993; MANALO *et al.*, 2010). Uma importante classe de polímeros é constituída pelas poliolefinas termoplásticas. As resinas incluídas nessa classe são compostas apenas por átomos de carbono e hidrogênio, ligados por cadeias não aromáticas. As duas poliolefinas mais comuns são: polipropileno (PP) e polietileno (PE). Ambas apresentam ampla gama de aplicações, propriedades excepcionais, tais como fácil moldagem e alta resistência a impactos e à fratura, e estão entre os plásticos mais comercializados da atualidade (PRAKASH, 2013; DUTRA *et al.*, 2014).

O polipropileno, em comparação com o polietileno, apresenta melhor resistência a impacto, tenacidade à fratura e é amplamente utilizado para a formação de fibras (PRAKASH, 2013). Entre os anos 1999-2014, a demanda mundial de PP aumentou em média 5% por ano. Houve uma diminuição desta taxa entre os anos de 2009-2014 devido ao enfraquecimento dos mercados automotivos e construção civil. Ao longo dos últimos cinco anos, contudo, registou-se um novo aumento da procura mundial, na ordem de 5,5% por ano (IHS MARKIT, 2015). De acordo com as previsões da empresa de consultoria GBI *Research*, o consumo global de polipropileno aumentará de 42,3 milhões de toneladas de polímeros em 2011 para 62,4 milhões de toneladas de polímeros em 2020 (MUNDOPLAST, 2013). O forte interesse econômico neste material impulsiona a busca por melhorias em seu processo produtivo.

Na procura por uma operação mais eficiente e segura, o controle do processo desempenha um papel importante, pois permite integrar diferentes equipamentos e processos industriais, mantendo variáveis de saída em valores nominais ou ótimos, reduzindo a variabilidade e minimizando os efeitos de perturbações que surgem ao longo da operação. Independentemente do sistema de controle selecionado, o monitoramento adequado das variáveis-chave do processo é uma ferramenta necessária e indispensável para uma ação de controle apropriada. No entanto, em um sistema de produção real, nem sempre há instrumentos de medição disponíveis para todas as variáveis. Ou o equipamento de fato não existe, ou seu custo de aquisição/manutenção torna seu uso inviável (KHATIBISEPEHR; HUANG; KHARE, 2013; BALBINOT; BRUSSAMARELLO, 2012). Em polimerização, é estratégico conhecer, entre outras variáveis, o índice de fluidez (MI) e o teor de solúveis em xileno (XS), que são parâmetros de qualidade da resina geralmente não medidos em linha. Na ausência de instrumentos para essas e outras variáveis, recorrem-se às análises *off-line*, que são realizadas em laboratórios. No entanto, estes procedimentos demandam tempo, tornando impossível determinar as variáveis tão frequentemente quanto necessário para o monitoramento adequado do processo. Isso pode, conseqüentemente, prejudicar a ação de controle, levando à perda de produção e eficiência (bem como gastos desnecessários com matérias-primas, energia, etc.) (PRATA *et al.*, 2009; SHENOY *et al.*, 2013).

Para considerar uma abordagem mais realista, este trabalho propõe um esquema de sensoriamento virtual, baseado em filtro de partículas (FP) e rede neural artificial (RNA). Este esquema compreende duas tarefas de estimação: a primeira é realizada pelo FP para a redução da incerteza e observação de variáveis latentes; e, a segunda, por meio da RNA, possibilita a detecção das propriedades finais de polímero: MI e XS.

1.2. Objetivos

Diante das dificuldades encontradas para um bom monitoramento do processo, a modelagem matemática desempenha um papel fundamental, pois permite a descrição dos fenômenos envolvidos no processo com a previsão de seu comportamento, frente a mudanças e a novas condições operacionais. Neste sentido, o presente trabalho tem como objetivo principal aplicar uma técnica de

identificação de sistemas (modelagem empírica), baseada em redes neurais, em conjunto com a ferramenta de estimação de estados por filtro de partículas, buscando entender seus desenvolvimentos e limitações.

Especificamente, são abordados os seguintes temas:

- Estudos preliminares do comportamento dinâmico do processo: definição do modelo rigoroso e obtenção de medidas simuladas;
- Obtenção de um modelo simplificado do processo, utilizando redes neurais e comparação com o modelo rigoroso;
- Avaliação da ferramenta de estimação (seleção dos parâmetros do filtro como número de partículas e desvio padrão para geração das partículas)
- Implementação em linha do filtro de partículas e da rede neural associados com as estruturas de controle;
- Aplicação de testes de desempenho para avaliar a performance do novo esquema proposto.

1.3. Trabalhos preliminares

Esta dissertação foi desenvolvida no grupo de pesquisa em Métodos Computacionais, Controle e Estimação (LAMCES), no Centro de Ciências Agrárias e Engenharias da Universidade Federal do Espírito Santo (UFES). Este grupo tem se dedicado à avaliação de estratégias de estimação com filtro de partículas e de controle de processo para problemas típicos de Engenharia, como escoamento em dutos de petróleo, fragmentação e classificação de minérios e operação de reatores químicos. O estudo a respeito da polimerização de propeno, que culminou nesta dissertação de mestrado, gerou os trabalhos preliminares apresentados abaixo.

O esquema para redução de incerteza e estimação de variáveis latentes em conjunto com as estruturas de controle foi inicialmente testado considerando um estudo de caso mais simples, como um tanque de aquecimento. Os resultados obtidos foram descritos no artigo apresentado no XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química, em Fortaleza (DIAS *et al.*, 2016a). Posteriormente, um esquema semelhante foi avaliado para um CSTR considerando um arranjo de controle cascata. Os resultados obtidos foram descritos no artigo apresentado no XIX Encontro Nacional de Modelagem Computacional, em João Pessoa

(CARVALHO *et al.*, 2016). Esses dois artigos estão apresentados como anexos a esta dissertação. Finalmente, o esquema de estimação-controle foi aplicado ao reator de polimerização de propeno, culminando no artigo “*Propylene polymerization reactor control and estimation through particle filter and neural network*” em fase de submissão para uma revista internacional.

1.4. Organização do texto

Para a realização da tarefa proposta, esta dissertação contempla um cenário de investigações teórico-computacionais, baseado na análise crítica de trabalhos presentes na literatura, encontrando-se estruturado nos capítulos, conforme descrição, a seguir.

No capítulo 2 – **Polipropileno** – é apresentado um panorama geral sobre essa importante resina, incluindo um cenário econômico atualizado e uma revisão sobre os métodos de polimerização mais usuais. O objetivo é demonstrar que ainda existe muito espaço para melhorar tais métodos.

No capítulo 3 – **Monitoramento de Processos** – são apresentadas as principais abordagens para a medição de variáveis, ressaltando-se suas vantagens, desvantagens e limitações.

No capítulo 4 – **Métodos Bayesianos** – são apresentadas ferramentas estocásticas baseadas no Teorema de Bayes e utilizadas para a estimação de estado, destacando exemplos de aplicações no contexto de polimerização.

No capítulo 5 – **Redes Neurais Artificiais** – é apresentada uma breve introdução sobre a técnica de modelagem empírica baseada na capacidade de transmissão e excitabilidade do sistema nervoso biológico: redes neurais artificiais.

No capítulo 6 – **Metodologia** – são apresentados os procedimentos necessários para a implementação do esquema de controle com o sensor virtual associado, incluindo a definição do modelo rigoroso, a obtenção das medidas simuladas, a obtenção do modelo simplificado e a implementação da rede neural e do filtro de partículas em linha.

No capítulo 7 – **Resultados e Discussão** – são apresentados os principais resultados de todas as etapas desse trabalho de pesquisa, acompanhados de uma discussão sobre seus significados.

No capítulo 8 – **Conclusão** – são apresentadas as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

2 POLIPROPILENO

Este capítulo apresenta uma visão geral sobre um importante material polimérico: o polipropileno. Destacam-se algumas de suas importantes características, tais como seu baixo peso e elevada rigidez e resistência química, que o fazem um material muito versátil e vendável. Apresenta-se também um breve histórico sinalizando sua descoberta, um cenário econômico atualizado e aspectos relevantes de sua fabricação. Duas das principais tecnologias de produção são evidenciadas (tecnologias *Spheripol* e LIPP) e os processos apresentados, incluindo importantes trabalhos encontrados na literatura.

O monômero utilizado para a produção de polipropileno é o propeno (também chamado de propileno e de fórmula química igual a C_3H_6), obtido em refinarias de petróleo (na etapa do craqueamento da nafta, por exemplo). O PP é uma importante resina termoplástica, apresenta baixa densidade, o que permite a fabricação de peças mais leves, e elevada rigidez, que confere uma boa resistência a impactos, além de características químicas que o tornam extremamente versátil e adequado para inúmeras aplicações. Está presente nos diversos setores industriais, como na fabricação de peças utilizadas em automóveis, nos tubos e conexões utilizados na indústria química e nas embalagens alimentícias, além de fazer parte do cotidiano da sociedade contemporânea, sendo utilizado na fabricação de mesas, cadeiras, brinquedos e outros utensílios domésticos (DUTRA *et al.*, 2014; PRAKASH, 2013; ODIAN, 2004).

2.1. Breve histórico

As poliolefinas foram desenvolvidas a partir da década de 1950, com a obtenção de novos catalizadores de polimerização pelo alemão Karl Ziegler. Esse pesquisador, em 1953, descobriu que era possível obter polímeros de eteno com alto peso molecular adicionando sais de transição, como tetracloreto de titânio ($TiCl_4$), ao catalisador alquilalumínio ($AlEt_3$). Partindo dessa ideia, Giulio Natta, utilizando o propeno e um sistema catalítico de $TiCl_4/AlEt_3$, obteve um polímero não-homogêneo com aspecto de borracha. Utilizando trióxido de cromo (CrO_3) como catalisador,

conseguiu, em 1955, obter PP isotático, ou seja, polipropileno que apresente o grupo metila sempre do mesmo lado da cadeia molecular. Desenvolveu, juntamente com Ziegler, uma grande variedade de sistemas catalíticos heterogêneos conhecidos como Ziegler-Natta e divididos em gerações que representam a evolução do processo produtivo. Cada nova geração que surge representa uma melhoria na atividade catalítica, na produtividade, no índice de isotaticidade e na morfologia da resina formada (CERRUTI, 1999; ROSA, 2013).

2.2. Cenário econômico

O Brasil é o principal produtor, na América Latina, de petroquímicos de primeira geração (petroquímicos básicos, tais como eteno, propeno e aromáticos) e de segunda geração (resinas e intermediários, tais como polietileno, polipropileno e fibras). As resinas termoplásticas – PE, PP e Policloreto de Vinila (PVC) - representam uma expressiva parcela dessa produção. São *commodities* comercializadas globalmente e seus preços são influenciados pelo custo da matéria prima, pela demanda do produto e pelo transporte (BRASKEN, 2015).

No período entre os anos de 1999 a 2014, a demanda global de PP aumentou, em média, 5% ao ano. Observou-se uma diminuição nesta taxa, entre os anos de 2009 a 2014, decorrente do enfraquecimento dos mercados automotivos e da construção civil. Nos últimos cinco anos, porém, notou-se um novo aumento nesta demanda, da ordem de 5,5% ao ano (IHS MARKIT, 2015). De acordo com previsões da empresa de consultoria GBI *Research*, o consumo mundial de polipropileno vai aumentar de 42,3 milhões de toneladas, base 2011, para 62,4 milhões de toneladas em 2020 (MUNDOPLAST, 2013).

A demanda brasileira por poliolefinas experimentou forte impacto em 2015 em virtude da crise econômica, sofrendo retração de 5% em relação ao ano anterior. Entretanto, houve um aumento de 4% na produção brasileira em relação a 2014 e o excedente, não absorvido pelo mercado interno, foi exportado. Nos EUA, em 2015 a demanda de PP aumentou em 5,5% em relação a 2014 com o aumento da competitividade das empresas e a diminuição do preço do propeno; e, na Europa, cerca de 5,18% de aumento. Melhorias no processo produtivo (otimização de parâmetros de produção e redução de gargalos logísticos, etc.) levaram a um aumento de 6% no volume de produção no ano de 2015 (BRASKEN, 2015). Esse

forte interesse econômico tem impulsionado cada vez mais a busca por melhorias nos processos produtivos.

2.3. Métodos de polimerização

Os métodos de polimerização de propeno podem ser classificados em algumas categorias, dentre as quais se destacam: polimerização em solução, em lama (*slurry*), em fase gasosa e em massa (*bulk*), produzindo resinas com as mais variadas características e aplicações (LIMA, 2010). Outros métodos incluem processos de polimerização em emulsão, em dispersão, por precipitação e em suspensão, por exemplo (MACHADO; LIMA; PINTO, 2007).

Na polimerização em solução, monômero e polímero compõe uma solução homogênea com o solvente e a temperatura do meio é mantida elevada, entre 130 e 250 °C. Este processo permite um bom controle sobre a massa molar e a distribuição de massas molares, além de fácil remoção de calor. No entanto, dificilmente permite a obtenção de resinas com massas molares elevadas em virtude do rápido aumento da viscosidade com a concentração. Acrescente-se, ainda, que com as dificuldades associadas a utilização de solvente, este processo foi gradualmente substituído por outros, tais como em lama ou em fase gasosa (FISCH, 2004; LIMA, 2010; ROSA, 2013).

A polimerização em lama é um processo heterogêneo em que apenas o monômero é solúvel num solvente. Este processo permite um excelente controle da temperatura de reação e a obtenção de polímeros com diferentes características e aplicações. Este método exibe um elevado custo de produção e taxa de polimerização reduzida em virtude do inchamento das partículas de polímero com o solvente, mas devido à sua flexibilidade de operação, esta tecnologia é amplamente utilizada (LIMA, 2010; ROSA, 2013; MENG *et al.*, 2013).

Na polimerização em fase gasosa, a reação ocorre na interface entre o catalisador sólido e a matriz polimérica. O monômero é inserido na mistura reacional através da fase gasosa, o que também promove a agitação das partículas de polímero e ajuda na remoção do calor gerado. Este processo é caracterizado, entre outras: a) pela ausência de fase líquida, permitindo que restrições operacionais relacionadas com a viscosidade ou solubilidade sejam removidas; e, b) por elevadas taxas de reação, o

que dificulta o controle da temperatura do meio reacional. Não requer um passo adicional para a recuperação de solventes, o que permite a redução dos custos operacionais (MACHADO *et al.*, 2008; ROSA, 2013).

A polimerização em massa não requer um diluente e usa o próprio monômero líquido como ambiente de polimerização. Este método apresenta taxa de reação elevada devido à alta concentração de monômero na mistura reacional e permite fácil separação e purificação da resina formada. Esta polimerização pode ser realizada em reatores contínuos de tanque agitado (CSTR) ou em reatores tubulares tipo *loop* (MACHADO *et al.*, 2008; ROSA, 2013).

A escolha do sistema catalítico também é muito importante e afeta diretamente as características do polímero produzido. Os catalisadores Ziegler Natta (ZN) proporcionam um melhor controle da micro e macroestrutura do polímero e das suas propriedades finais, permitindo a obtenção de materiais com diferentes características e aplicações (MACHADO; PINTO, 2011). Já os catalisadores metallocênicos têm alta atividade, permitem obter propriedades finais inviáveis via catalisadores ZN, mas não são sensíveis ao hidrogênio, dificultando o controle do tamanho da cadeia polimérica (ROSA, 2013).

Existem diversos processos industriais para obtenção de polipropileno, combinando tecnologias de produção e de catalisadores. A escolha dependerá, além da aplicação do polímero, de fatores cinéticos (como composição da cadeia), tecnológicos (como dificuldade na dissipação de calor), econômicos (custos de produção) e ambientais (como geração de resíduos) (LIMA, 2010; DUTRA *et al.*, 2014; TOBITA; HAMIELEC, 2015).

2.4. Tecnologias de produção

Um dos processos de produção de PP mais utilizado baseia-se na tecnologia *Spheripol*, que considera a polimerização em massa de propeno. São usados dois reatores tubulares tipo *loop* para obtenção de homopolímero ou copolímero aleatório e um ou dois reatores de leito fluidizado, combinando polimerização em fase gasosa, para a produção de copolímeros de impacto (REGINATO; ZACCA; SECCHI, 2003; LUCCA, 2007; ROSA, 2013). Este processo contempla etapas de pré-contato e pré-polimerização, em que ocorrem a preparação do sistema catalítico e o pré-tratamento do propeno. A seguir, o monômero, o hidrogênio e os catalisadores são

alimentados no primeiro reator tipo *loop*. À corrente de saída são acrescentados monômero e hidrogênio e essa mistura alimenta o segundo reator tipo *loop*. A lama efluente, composta por partículas de polímero, monômero, propano e hidrogênio, é transportada por um tubo aquecido para um vaso tipo *flash*, responsável pela evaporação do líquido. Por fim, essa corrente alimenta um degaseificador de alta pressão que remove o restante do monômero adsorvido nas partículas de polímero. O pó de polímero é então conduzido a um filtro de baixa pressão e direcionado para uma seção de extrusão onde são formados os *pellets* (forma usual de comercialização do PP). Para produção de copolímero, a corrente do vaso *flash*, combinada com monômero e hidrogênio, alimenta um reator de leito fluidizado (REGINATO, 2001; LUCCA, 2007; ROSA, 2013). A Figura 1 mostra um esquema simplificado do processo.

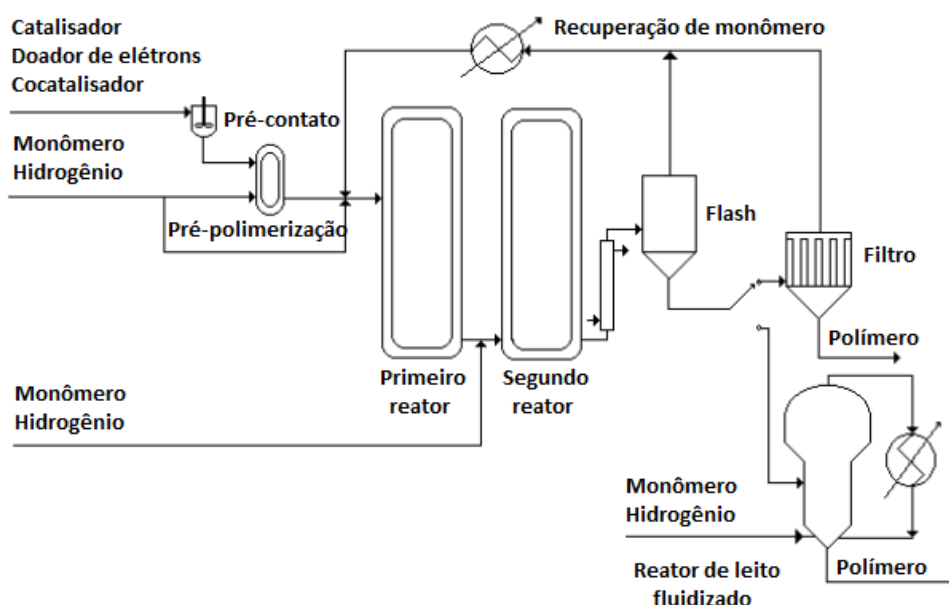


Figura 1 - Esquema simplificado do processo Spheripol. Fonte: REGINATO (2001).

A modelagem de reatores tubulares tipo *loop* em sistemas de polimerização começou a ser estudada em trabalhos científicos na década de 1970, considerando reatores de mistura perfeita para descrever o sistema. Em 1993, Zacca e Ray realizaram o estudo pioneiro que avaliou a importância de um modelo distribuído para esses sistemas (ZACCA; RAY, 1993; ROSA; MELO; PINTO, 2012). Reginato, Zacca e Secchi (2003), considerando que os reatores industriais de polimerização operam com elevadas taxas de reciclagem da mistura reacional, propuseram um

modelo para reatores de tipo loop assumindo comportamento de CSTR não-ideais. Lucca *et al.* (2008), seguindo as ideias de Zacca e Ray (1993), construíram e validaram um modelo matemático distribuído para o processo de polimerização de propileno capaz de estimar valores de variáveis importantes para o monitoramento do processo. Recentemente, Fontoura *et al.* (2016) propuseram a modelagem bifásica para esses reatores usando balanços transientes para cada fase do sistema.

Outra tecnologia amplamente utilizada no contexto de produção de propeno é a LIPP - *Liquid Pool Polymerization*, que considera polimerização em massa realizada em um único reator agitado mecanicamente operando a alta pressão. O monômero é alimentado no reator no estado líquido juntamente com o sistema catalítico. Não há necessidade de diluente, pois o próprio propeno é utilizado como meio de suspensão para as partículas de polímero sólido. Hidrogênio é alimentado como agente de transferência de cadeia para o controle da distribuição de massas molares. A corrente de saída do reator é enviada para um ciclone, o PP formado é separado do monômero evaporado que é recirculado para o reator após sua condensação (REGINATO, 2001; MATTOS NETO; PINTO, 2001; PRATA, 2009). A Figura 2 mostra um esquema simplificado do processo.

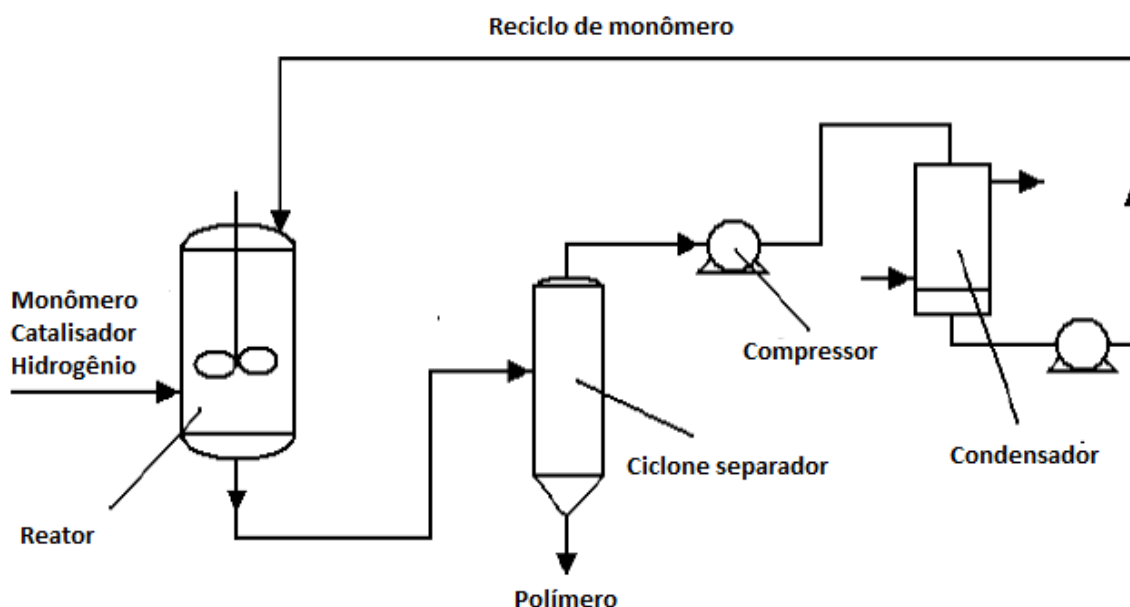


Figura 2 - Processo de produção de polipropileno em fase líquida. Fonte: REGINATO (2001). Modificado pelo autor.

Sarkar e Gupta (1992) propuseram um modelo estacionário para esses reatores capaz de prever a produtividade e os momentos de distribuição do peso molecular do polipropileno. Mattos Neto e Pinto (2001) também construíram um modelo matemático do processo LIPP para produção de PP. Estes autores consideram um conjunto de equações detalhadas derivadas de balanços de massa, de energia e de momentum para predição de taxas de reação, de fluxo de calor e de perdas de carga, bem como um balanço populacional para o cálculo do peso molecular, da composição da cadeia e da distribuição do tamanho de partícula do polímero final. Assim, eles avaliaram mais variáveis em suas análises e compararam as previsões do modelo com dados de processo reais, tarefa que ainda não havia sido realizada. Oliveira *et al.* (2003) estudaram as condições operacionais para este processo, buscando gargalos e produtividade máxima. Estes autores identificaram que a polimerização de propeno em massa com reciclo material é instável em virtude do acoplamento que a corrente de reciclagem promove, mas, com estratégias de controle adequadas, é possível estabilizar as condições operacionais.

Prata *et al.* (2006; 2008; 2009) também propuseram um modelo fenomenológico para este processo visando avaliar procedimentos de reconciliação de dados, monitoramento e estimativa de parâmetros em tempo real. Rosa *et al.* (2012) estudaram a dinâmica do processo LIPP e descobriram que seu comportamento pode ser muito mais complexo e caótico do que se pensava anteriormente para uma ampla gama de condições operacionais. Posteriormente, Rosa (2013) avaliou a dinâmica e a estabilidade de ambos os tipos de reatores e concluiu que o tipo reator do tipo *loop* apresenta comportamento complexo em condições muito mais específicas, somente em regiões onde a troca térmica é desfavorável, enquanto o do tipo LIPP apresenta comportamento complexo em grandes faixas operacionais.

Recentemente, Dutra *et al.* (2014) propuseram a modelagem e o controle para o processo de polimerização em massa de propeno com alimentação de monômero líquido, utilizando a tecnologia LIPP, um único CSTR e três sistemas diferentes de catalisadores incluindo os tipos Ziegler-Natta e Metallocenico. O foco foi na reconfiguração de controle para considerar a troca de catalisadores em linha e satisfazer as propriedades desejadas do polímero. Contudo, estes autores não consideraram a reciclagem de propeno não reagido e a limitação dos instrumentos de medição. A este respeito, Dias, Dutra e Silva (2016b) abordaram a questão da integração mássica, incluindo na modelagem a reutilização, e considerando, por

simplicidade, apenas os catalisadores Ziegler Natta para polímeros com alto peso molecular e baixa rigidez.

2.5. Comentários finais

O polipropileno é uma importante resina polimérica, com forte interesse econômico e versatilidade de aplicações. Pode ser obtido através de diferentes métodos de polimerização combinados com tecnologias de produção e de catalisadores. As duas tecnologias mais utilizadas, *Sheripol* e LIPP, consideram o processo em massa, com suspensão de monômero líquido, realizado em reatores tubulares e CSTR, respectivamente. Em certas regiões operacionais, ambos apresentam comportamentos complexos. Isso exige um monitoramento e controle de qualidade, para garantir a segurança da operação e manter a qualidade da resina formada. Na tecnologia *Spheripol*, isso acontece principalmente quando a troca térmica é desfavorável, enquanto na LIPP essa complexidade se apresenta em uma faixa maior de condições operacionais.

Em virtude disso, para avaliar o desempenho da estrutura de estimação-controle proposta nesse trabalho, diante de um cenário mais instável, o sistema LIPP foi considerado no estudo.

3 MONITORAMENTO DE PROCESSOS

Este capítulo apresenta um breve panorama sobre as abordagens existentes para o monitoramento de processos, destacando-se suas principais vantagens, limitações e impactos nas estratégias de controle. Aborda-se também uma solução tecnológica mais moderna para a observação de processos, os sensores inferenciais, que por meio de estimadores, permitem a obtenção de variáveis latentes (ou seja, de medição difícil/indisponível) a partir de dados de medição disponíveis.

Os processos de polimerização, como qualquer processo químico, estão sujeitos a perturbações que podem alterar a qualidade do produto final. Por isto, é necessário utilizar estruturas de controle, capazes de lidar com tais situações, corrigindo seus efeitos. Os controladores desempenham um importante papel na busca crescente por uma operação mais eficiente e segura, mas exigem uma observação adequada do processo para uma ação eficaz (SEBORG; EDGAR; MELLICHAMP, 2004).

Para o monitoramento de processos existem abordagens *in-line*, *on-line* e *off-line* (HERGETH, 1999), que classificam os sensores em relação ao seu contato com o mensurando e sua localização no processo.

A abordagem *in-line* se refere a sensores físicos localizados no interior do processo/equipamento e que estão em contato direto com o mensurando, como por exemplo, um termopar inserido em um reator, enviando dados de temperatura; ou, um sensor de nível tipo radar, localizado sobre um tanque de acúmulo, enviando informações sobre a altura de líquido no equipamento. Estes dispositivos transmitem dados continuamente, o que permite o monitoramento e o controle das variáveis em tempo real (FONSECA; DUBÉ; PENLIDIS, 2009; APRUZZESE; BALKE; DIOSADY, 2000). A Figura 3 exibe um esquema simplificado para essa abordagem.

Os sensores *on-line* são localizados ao longo do processo e permitem a obtenção do mensurando a partir de métodos analíticos, que são realizados quase continuamente, como a cromatografia gasosa. O tempo de amostragem e análise é muito curto em comparação com o tempo de reação global, permitindo assim o monitoramento adequado e o controle eficiente da reação (HERGETH, 1999). A Figura 4 exibe um esquema simplificado para essa abordagem.

Já a abordagem “*off-line*” fornece uma coleção de dados discretos, provenientes de análises laboratoriais de processamento mais lento, com significativa perda de informação entre os tempos de amostragem. Estes procedimentos demandam tempo, impossibilitando conhecer o valor das variáveis com a frequência necessária para um monitoramento adequado e, conseqüentemente, a ação de controle sofre prejuízos, podendo levar a perda de produção e de eficiência (gastos desnecessários com matéria prima, energia, etc.) (FONSECA; DUBÉ; PENLIDIS, 2009; PRATA *et al.*, 2009; SANTOS *et al.*, 2006). A Figura 5 exibe um esquema simplificado para essa abordagem.

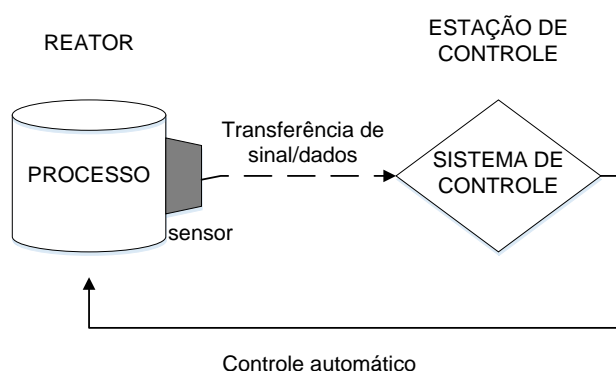


Figura 3 - Diagrama esquemático da abordagem *in-line* para monitoramento.

Fonte: HERGETH (1999). Modificado pelo autor.

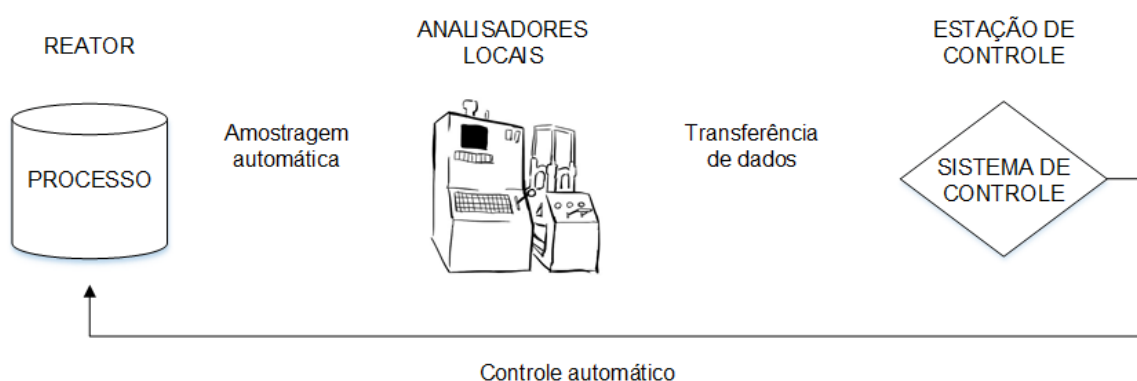


Figura 4 - Diagrama esquemático da abordagem *on-line* para monitoramento.

Fonte: HERGETH (1999). Modificado pelo autor.

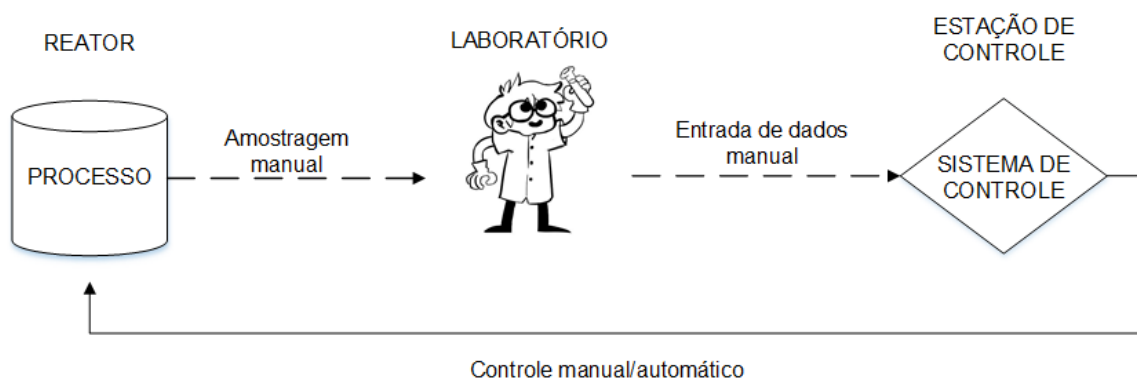


Figura 5 - Diagrama esquemático da abordagem *off-line* para monitoramento.

Fonte: HERGETH (1999). Modificado pelo autor.

Existem diversos sensores físicos disponíveis para os parâmetros operacionais de reatores de polimerização, isto é, temperatura, pressão, nível e vazão. Como as propriedades das partículas e dos polímeros (distribuição de tamanho de partículas, distribuição de peso molecular, etc.), necessitam, para a sua aferição, de instrumentos cujos custos de aquisição e de manutenção são muito elevados, muitas vezes sua utilização torna-se inviável. Além disto, as propriedades finais das resinas são geralmente obtidas a partir de análises *off-lines*, que podem durar até seis horas, o que é inadequado para estratégias de controle (HALIM; SATA, 2013; FONSECA; DUBÉ; PENLIDIS, 2009; SANTOS *et al.*, 2005; KIM; CHOI, 1991).

3.1. Limitação dos instrumentos de medida

Mesmo quando o instrumento de medição existe e é viável sua utilização em linha, as informações, por ele fornecidas, podem apresentar diversos tipos de erros (de medição, provenientes da precisão finita do equipamento, e/ou grosseiros, advindos de falhas ao longo da operação). Tal conjunto de dados, devido à presença de incertezas, geralmente não obedece às leis de conservação das grandezas e às restrições físicas impostas ao processo. Deste modo, antes de ser utilizado, ele deve passar por uma etapa de retificação, que consiste em um ajuste dos valores medidos, de modo a compensar erros de medição e possíveis *outliers* (BALBINOT; BRUSSAMARELLO, 2012; PRATA *et al.*, 2009).

Em geral, os erros de medição são aleatórios, considerados como uma pequena fração do valor medido, apresentam média zero e variância conhecida. Já os erros grosseiros são valores maiores, provenientes de eventos não aleatórios, como

falhas em equipamentos, e por isso devem ser tratados de maneira diferente. Técnicas de reconciliação de dados consideram apenas a presença de erros do primeiro tipo e, através de um tratamento estatístico, ajustam os valores medidos visando respeitar leis fundamentais como balanços de massa e de energia (PRATA, 2009).

Uma outra maneira de minimizar os efeitos das incertezas e da ausência de instrumentos é a utilização de sensores virtuais, que podem complementar ou substituir sensores físicos (NGUYEN *et al.*, 2015; KHATIBISEPEHR; HUANG; KHARE, 2013; DIAS *et al.*, 2016).

3.2. Sensores virtuais

Nas últimas duas décadas, observou-se um crescente interesse no desenvolvimento de sensores virtuais, também chamados de sensores inferenciais ou *soft sensors*. Eles apresentam uma ampla gama de aplicações, permitindo reduzir custos associados a produtos fora de especificação, detectar falhas, etc. Isso é possível porque são ferramentas inferenciais que possibilitam a estimação *on-line* de variáveis latentes com base em outras variáveis, que podem ser medidas em tempo real e são relacionadas com a variável de interesse. Para isso, necessitam de um modelo que relacione essas variáveis (LIN *et al.*, 2007; KADLEC, GABRYS e STRANDT, 2009; KHATIBISEPEHR, HUANG e KHARE, 2013).

Os sensores virtuais são divididos em três classes, com base na técnica de modelagem empregada:

- *model-driven*, baseados em modelos fenomenológicos, ou seja, equações que descrevem os fenômenos envolvidos no processo;
- *data-driven*, baseados em correlações empíricas obtidas através de métodos de inteligência artificial, tais como redes neurais, os de abordagem de identificação estatística; dentre outros; e,
- sensores híbridos, que são baseados na combinação das duas primeiras classes, ou seja, nos conhecimentos acerca do processo e em correlações empíricas.

Embora tenham bastante atenção na literatura, o desenvolvimento e implementação de sensores virtuais ainda configuram um grande desafio. Em grande parte, isso decorre da necessidade de um modelo para inferir a variável de interesse a partir

das informações disponíveis. A escolha do modelo, a determinação de seus parâmetros, a seleção de quais variáveis são relevantes, dentro do conjunto de observações disponíveis, possíveis atrasos de tempo e flutuações nas medições, entre outros fatores, influenciam no desempenho do sensor inferencial e devem ser considerados para cada etapa do projeto (KHATIBISEPEHR; HUANG; KHARE, 2013; POLZER *et al.*, 2009; LOTUFO; GARCIA, 2008).

3.3. As ferramentas inferenciais e a estimação

As ferramentas inferenciais geralmente requerem um modelo dinâmico do sistema que fornece a evolução temporal dos estados, um modelo de medição, que informa o valor das variáveis medidas disponíveis, tais como temperaturas, fluxos, etc., e um algoritmo que relaciona toda a informação disponível com o conhecimento sobre o processo, para se obter as estimativas desejadas (RINCON *et al.*, 2013).

O modelo estocástico discreto mostrado nas Equações 1 e 2 pode ser utilizado para representar um sistema não-linear.

$$x_{k+1} = f(x_k, \mu_k) + w_k \quad (1)$$

$$y_{k+1} = h(x_k, p_k) + v_k \quad (2)$$

Nestas equações, $x \in \mathbb{R}^{n_x}$ representa o vetor de estados, μ e p os vetores de variáveis de entrada e parâmetros, $y \in \mathbb{R}^{n_y}$ o vetor de medidas, e $w \in \mathbb{R}^{n_w}$ e $v \in \mathbb{R}^{n_v}$ os vetores de ruídos aditivos dos estados e do processo. $f: \mathbb{R}^{n_x} \rightarrow \mathbb{R}^{n_x}$ indica o modelo de evolução de estados: uma função não-linear de variáveis de estado e de entrada, corrompida pelos ruídos do processo; e $h: \mathbb{R}^{n_x} \rightarrow \mathbb{R}^{n_y}$ uma função de medição (observação), que relaciona estados e parâmetros, e é corrompida por ruídos de medição. Supõe-se que w e v têm média zero e seguem uma distribuição normal. O subíndice k denota o instante do tempo (SILVA, 2012; RINCON *et al.*, 2013).

O problema de estimação do estado visa obter informações sobre o vetor x com base nos modelos de evolução e observação, considerando as seguintes suposições (SILVA, 2012; RINCON *et al.*, 2013; CALIXTO, 2014):

- Para o modelo de evolução dos estados, o estado atual depende apenas do estado anterior e não de toda a sua história. Apenas o passado mais recente importa.
- As medições dependem apenas do estado atual, elas são independentes entre si.
- O estado atual depende somente da sua observação passada, através de sua própria história.

Métodos bayesianos são ferramentas inferenciais que permitem a estimação das variáveis com base no conhecimento disponível do processo e em modelos de evolução para as observações e para variáveis a serem estimadas. Esses métodos seguem as premissas apresentadas acima e, como são capazes de lidar com problemas lineares e não-lineares, com ruído gaussiano e não-gaussiano, e com amostras de dados regulares e irregulares, apresentam um leque extenso de aplicações, despertando forte interesse no ambiente acadêmico e industrial. Entretanto, nem sempre o modelo de evolução é conhecido. Nessas situações, uma alternativa é combinar o método bayesiano com outras estratégias, como os algoritmos de aprendizagem de máquinas. Essa grande flexibilidade dos métodos bayesianos os tornam ferramentas promissoras para integrar sensores inferenciais (KHATIBISEPEHR, HUANG e KHARE, 2013; LIU, 2016; SPEEKENBRINK, 2016).

3.4. Aplicações dos sensores inferenciais em sistemas de polimerização

Os sensores inferenciais surgiram como alternativa promissora para a falta de instrumentos de medição. No contexto de polimerização podem ser utilizados principalmente para a inferência de parâmetros de qualidade da resina. Vários sensores inferenciais foram estudados, recentemente, na literatura. Ogawa *et al.* (1999) desenvolveram um esquema de sensoriamento *on line* para parâmetros de qualidade, em um processo de produção de polietileno, baseado em modelos empíricos e em um filtro de Kalman. Han, Han e Chung (2005) propuseram 3 sensores virtuais baseados nas técnicas de modelagem caixa preta, máquina de vetores de suporte (*support vector machine* - SVM), regressão por mínimos quadrados parciais (*partial least squares* - PLS), e rede neural artificial (RNA), para predição do índice de fluidez em processos de polimerização de estireno-acrilonitrilo e de polipropileno. Zhang, Jin e Xu (2006) consideraram um arranjo de redes neurais

artificiais agregadas, treinadas de maneira sequencial e visando minimizar o erro de predição e a correlação entre as redes, para a predição do índice de fluidez em um processo de polimerização de propeno. Gonzaga *et al.* (2009) propuseram um sensor virtual baseado em uma rede neural para monitoramento e controle da viscosidade em um processo de produção de tereftalato de polietileno (PET). Jiang *et al.* (2012) desenvolveram um modelo preditivo ótimo para a obtenção do índice de fluidez em um processo de polimerização de propeno. Esses autores empregaram um método de máquina de vetor de relevância (*relevance vector machine* - RVM) para construção do modelo e um algoritmo de otimização modificado baseado em enxames de partículas (*modified particle swarm optimization* - MPSO) para otimizar os parâmetros do RVM. Zhang, Wang e Liu (2014) utilizaram redes neurais com funções de ativação de base radial (RBF-NN) agregadas para prever o índice de fluidez em um processo de produção de polipropileno. Zhang, Liu e Zhang (2016) também consideraram a polimerização de propeno e apresentaram um novo sensor virtual baseado em máquinas de aprendizagem extrema (*extreme learning machine* - ELM) para a predição do MI. Nenhum desses autores citados considerou o emprego de um filtro de partículas associado com alguma outra ferramenta de estimação para a redução de ruídos de medição e melhora na estimação de variáveis latentes.

3.5. Comentários finais

O monitoramento adequado é um dos grandes desafios enfrentados pela indústria de polimerização. Mesmo com as soluções tecnológicas mais avançadas, nem sempre há instrumentos de medida disponíveis. Por isso, os principais parâmetros de qualidade da resina formada são geralmente determinados através de análises *off-lines* em laboratórios. Tais métodos são lentos e acabam prejudicando a ação de controle devido à baixa frequência de informação fornecida. Caso algum problema ocorra na planta, devido à demora da análise, até o controlador tomar conhecimento do ocorrido e realizar a ação de controle, haverá perda significativa com produtos fora de especificação, além de afetar a segurança da operação. Uma alternativa que vem despertando interesse do meio acadêmico e industrial é a utilização de sensores virtuais, que, com base em métodos inferenciais, predizem o valor de variáveis latentes a partir de variáveis conhecidas, como por exemplo parâmetros operacionais facilmente mensuráveis. Esses dispositivos têm sido bastante

estudados nos últimos anos e, apesar das melhorias de desempenho já obtidas, o desenvolvimento de ferramentas inferenciais para a estimação *on line* dos parâmetros de qualidade das resinas poliméricas continua a ser um problema atraente.

4 METODOS BAYESIANOS

Este capítulo apresenta uma breve introdução aos métodos bayesianos. O objetivo foi explicar de maneira simples, e menos abstrata, sem se aprofundar nas bases estatísticas, o princípio de funcionamento. Foram destacados dois dos métodos mais utilizados: os filtros de Kalman e os filtros de partículas. O segundo, por permitir aplicação em uma gama maior de processos, foi mais explorado.

O Teorema de Bayes propõe a utilização de toda a informação disponível (medições e fenômenos envolvidos no processo) como fonte de conhecimento para determinar a variável desconhecida. O objetivo é reduzir o grau de desconhecimento sobre essa variável. Quando obtidas novas informações, estas são combinadas com as anteriores, criando a base para os procedimentos estatísticos. Assim, como os dados (ou medições) y contêm informações sobre os estados (x), eles podem ser usados para atualizar a informação de x pela determinação da distribuição condicional de x dado y , como mostra a Equação 3 (POLZER *et al.*, 2009; ORLANDE *et al.*, 2012; LIU, 2016; SPEEKENBRINK, 2016).

$$\pi_{posteriori}(x) = \pi(x_k | y_0, \dots, y_k) = \frac{\pi(y_0, \dots, y_k | x_k) \pi(x_k)}{\pi(y_0, \dots, y_k)} \quad (3)$$

Nesta equação $\pi_{posteriori}(x)$ representa a distribuição a posteriori de x e $\pi(x_k | y_0, \dots, y_k)$ a distribuição condicional de x dado y . $\pi(y_0, \dots, y_k | x_k)$ é a função de verossimilhança, que corrige e incorpora mais informações à distribuição a priori ($\pi(x_k)$). Esta última é modelada a partir das informações previamente disponíveis de x . $\pi(y_0, \dots, y_k)$ é a distribuição de probabilidade marginal das medições.

Assumindo que os erros de medida são variáveis aleatórias que seguem uma distribuição Gaussiana, com média zero e matriz de covariância conhecida \mathbf{W} , a função de verossimilhança pode ser expressa pela Equação 4 (KAPIO e SOMERSALO, 2004).

$$\pi(y_0, \dots, y_k | x_k) = (2\pi)^{-n/2} |\mathbf{W}|^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} [\mathbf{y} - \mathbf{Y}(\mathbf{x})]^T \mathbf{W}^{-1} [\mathbf{y} - \mathbf{Y}(\mathbf{x})] \right\} \quad (4)$$

Nesta equação $\mathbf{Y}(\mathbf{x})$ representa um vetor com a solução do problema direto, considerando o mesmo instante de tempo dos dados experimentais disponíveis (\mathbf{y}) e empregando os valores dos estados (\mathbf{x}); e n é o número de dados experimentais disponíveis.

A estimativa também pode ser realizada sequencialmente, para instante de amostragem, por meio de um filtro recursivo. Este filtro apresenta duas etapas, uma de previsão e outra de atualização. A primeira fornece as variáveis de estado a partir do modelo do sistema entre os instantes de amostragem. A segunda modifica o valor predito com base nas informações de medição mais recentes (ARULAMPALAM *et al.*, 2002; ORLANDE *et al.*, 2012; SHENOY *et al.*, 2011; SPEEKENBRINK, 2016).

Diversos métodos bayesianos estão disponíveis na literatura. Dentre eles, duas importantes famílias de filtro, amplamente empregadas no contexto de estimação de estados e parâmetros, serão destacadas nessa seção: os filtros de Kalman e os filtros de partículas.

4.1. Filtros de Kalman

O filtro de Kalman (KF) é um dos métodos de estimação de estados e parâmetros mais utilizados. Esta ferramenta atua com um processo de predição-correção iterativo. A estimativa é feita a partir do balanço entre as informações do modelo dinâmico do processo com a informação do modelo de medição, os pesos são selecionados de modo a minimizar o erro quadrático médio da estimativa (JULIER e UHLMANN, 1997; WILSON, AGARWAL e RIPPIN, 1998; CHEN, 2003). A Figura 6 mostra um esquema simplificado da atualização do filtro de Kalman como preditor-corretor.

As equações de atualização do tempo propagam variáveis de estado e as covariâncias para se obter, desta forma, as estimativas *a priori* para o próximo instante. As equações de atualização das medições incorporam uma nova informação da variável observável nas estimativas anteriores para obter um ganho (ou melhoria) na estimativa *a posteriori*. A estimação é feita a partir do equilíbrio

entre as informações do modelo dinâmico do processo, com as informações do modelo de medição e com os pesos, selecionados de modo a minimizar o erro quadrático médio da estimativa (CHEN, 2003; DUARTE, 2007).

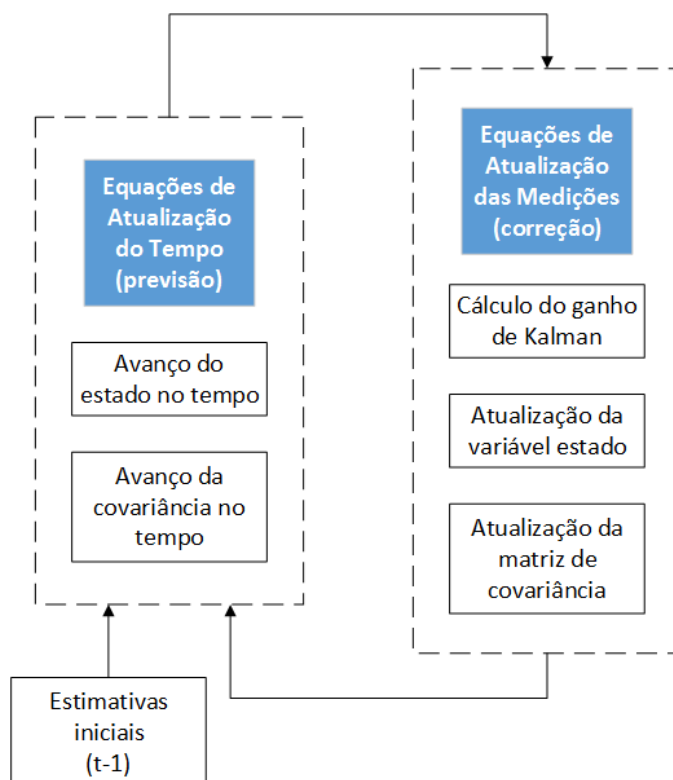


Figura 6 - Esquema simplificado da atualização do filtro de Kalman como preditor-corretor. Fonte: DUARTE (2007). Modificado pelo autor.

Para problemas de estimação de estados não-linear, a combinação entre as informações do modelo do processo e do modelo de medição resulta num conjunto infinito de equações acopladas que não podem ser resolvidas de maneira exata. Assim, a aplicação KF fica restrita a sistemas lineares (ELIÇABE e MEIRA, 1988; JULIER e UHLMANN, 1997).

No cenário de polimerização, a técnica mais utilizada baseia-se no Filtro de Kalman Estendido (EKF), que é capaz de lidar com as não-linearidades do processo. Esta ferramenta começou a ser estudada em 1962, para diferentes aplicações (ELIÇABE e MEIRA, 1988. FONSECA, DUBÉ e PENLIDIS, 2009; HALIM e SATA, 2013). Jo e Bankoff (1976) foram os primeiros a relatarem o uso de EKF no contexto da polimerização. Estes autores utilizaram este filtro para estimar a conversão e o peso molecular médio para a polimerização de acetato de vinila num reator CSTR. Desde então, inúmeros trabalhos surgiram na literatura aplicando a ferramenta em sistema

de polimerização, como Schuler e Suzhen (1985) que consideraram o filtro de Kalman estendido para estimação de estado *on-line* em um processo de polimerização de estireno em batelada; e Ellis *et al.* (1988) que utilizaram o EKF para estimação da distribuição de peso molecular em um reator de polimerização de metacrilato de metilo (MMA). Mais tarde, Kozub e MacGregor (1992) avaliaram 3 abordagens baseadas em EKF para um reator de polimerização semi-batelada em emulsão de borracha de estireno/butadieno (SRB). Já Srinivas, Arkun e Schork (1995) implementaram um esquema de estimação-controle considerando o EKF e um algoritmo de controle preditivo não linear (NL-MPC) para um processo de polimerização de α -Olefina. Em 2002, Prasad *et al.* (2002) também incorporaram um EKF em um esquema de NL-MPC aplicado a um reator de polimerização de estireno. Li *et al.* (2004) estimaram estados não medidos e parâmetros cinéticos para um reator contínuo de etileno-propileno-dieno (EPDM). Mais recentemente, Shenoy *et al.* (2011) e Shenoy *et al.* (2013) compararam o desempenho de filtros de Kalman, incluindo a versão estendida, com outros métodos de estimação.

A utilização do EKF se baseia na linearização local do modelo dinâmico em torno de uma condição nominal e, em seguida, na aplicação do filtro Kalman. Então, quando o erro de linearização é significativo, o EKF apresenta um desempenho ruim de estimativa. Além disso, quando o sistema em estudo apresenta dimensão elevada, a resolução das equações de evolução do estado e das funções de medição, para cada passo no tempo, torna-se computacionalmente exigente (PRAKASH; PATWARDHAN; SHAH, 2010). Assim, para processos altamente não-lineares e com grandes dimensões, como no caso da polimerização, esta ferramenta não é a mais adequada, entretanto seu uso ainda é bastante difundido devido a sua fácil implementação, em comparação com outras técnicas de estimativa, sua robustez e também a indisponibilidade de métodos alternativos para lidar com a complexidade dos processos de polimerização (JULIER e UHLMANN, 1997; SHENOY *et al.*, 2011; SHENOY *et al.*, 2013).

Para lidar com as limitações de linearidade apresentada pelo filtro de Kalman e por sua versão estendida, algumas outras ferramentas surgiram na literatura na década de 1990. Pode-se destacar duas novas versões do KF: o *Ensemble Kalman Filter* (EnKF), proposto por Evensen (1994); e o *Unscented Kalman Filter* (UKF), proposto por Julier, Uhlmann e Durrant-Whyte (1995).

O EnKF substitui a abordagem determinística empregada nos filtros de Kalman pelo Método de Monte Carlo para obter um conjunto de amostras aleatórias utilizadas nas

etapas de predição e correção. O filtro é inicializado com a criação de N partículas de uma dada distribuição. A cada passo no tempo, a partir da distribuição de ruídos de estado e de medição, um conjunto com N amostras de ruídos de estado e de medição também é criado. Então, as partículas e amostras são propagadas através da dinâmica do sistema para calcular uma nuvem de pontos transformados. Esse novo conjunto é utilizado para a determinação do ganho de Kalman e atualização das variáveis de estado e da matriz de covariância (EVENSEN, 1994; PRAKASH; PATWARDHAN; SHAH, 2010).

O UKF considera um conjunto de pontos (*sigma points*) escolhidos deterministicamente com média e covariância conhecidas e a *uncented transformation* (UT) para gerar uma nuvem de pontos transformados. A partir desse novo conjunto obtém-se uma estimativa média e nova covariância que são propagadas através da dinâmica do sistema não linear. O ganho de Kalman é então determinado e usado para calcular os estados e a matriz de covariância atualizados (JULIER; UHLMANN, 2004; PRAKASH; PATWARDHAN; SHAH, 2010; YANG; HUANG; PRASAD, 2014).

Os filtros de partículas são métodos alternativos aos filtros de Kalman, não exibem fortes restrições de aplicação e podem ser empregados para sistemas não lineares e não gaussianos sem a necessidade de linearização e a imposição de que o sistema siga uma distribuição probabilística específica. Por serem menos rígidos, são aplicáveis em uma ampla gama de processos e configuram uma estratégia interessante para o monitoramento de sistema altamente não lineares, como polimerização (ARULAMPALAM *et al.*, 2002; SHAO, HUANG e LEE, 2010; SPEEKENBRINK, 2016).

4.2. Filtros de Partícula

Filtros de partículas seguem a metodologia de Monte Carlo para resolver um problema da inferência bayesiana. Este problema está relacionado com a estimação de variáveis latentes em sistemas dinâmicos quando medições parciais estão disponíveis. Esta estimação é realizada *on-line*, de modo que, após cada observação sequencial, o estado relacionado a essa observação é estimado. Nesse sentido, esses filtros adotam uma abordagem de Amostragem por Importância Sequencial (SIS) para estimar a distribuição *a posteriori* (variáveis desconhecidas) a

partir de um conjunto de partículas representativo das variáveis do sistema (SILVA, 2012; SILVA *et al.*, 2016; SPEEKENBRINK, 2016).

Os filtros de partícula operam a partir de uma distribuição *a priori*, que fornece as informações necessárias para a análise inicial: a base para a criação das partículas (valores de um estado latente aleatoriamente amostrados). Essas partículas são propagadas ao longo do tempo para obtenção dos valores simulados. Para cada partícula é atribuído um peso, calculado a partir da função de verossimilhança (Equação 4), que compara as informações iniciais (valores simulados) com as medidas experimentais. Os pesos incorporam mais informações aos valores simulados para a determinação da distribuição *posteriori*.

No entanto, ao longo da evolução do algoritmo do filtro pode ocorrer um aumento gradual da variação dos pesos das partículas, até o limite extremo (após algumas evoluções) quando todas as partículas, exceto uma, têm um peso desprezível. Isto é chamado degeneração e requer mais tempo computacional para atualizar amostras que ajudam muito pouco na aproximação da distribuição posterior. Utilizar um maior número de partículas pode minimizar este efeito, mas, em muitas aplicações, o esforço computacional torna esta opção impraticável. Outra possibilidade é usar um passo adicional, a reamostragem, no qual as partículas de menor peso são eliminadas e as partículas de maior peso são replicadas, mantendo-se o número de partida e originando mais partículas perto da região de maior probabilidade.

O filtro de partículas que apresenta esta etapa adicional é chamado de filtro de Amostragem por Importância e Reamostragem Sequencial (SIR) (ARULAMPALAM *et al.*, 2002; ORLANDE *et al.*, 2012; SILVA, 2012; SILVA *et al.*, 2016; SPEEKENBRINK, 2016) e seu mecanismo está esquematizado, de maneira simplificada, na Figura 7.

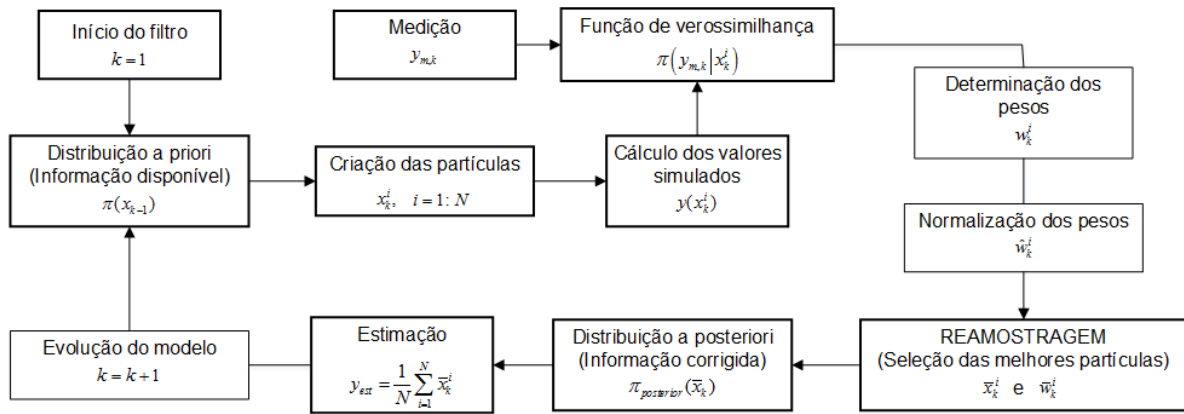


Figura 7 - Esquema simplificado do filtro de partículas SIR.

Na literatura existem inúmeros trabalhos abordando estimação de estados e de parâmetros através de filtros de partículas. No entanto, poucos são encontrados contemplando processos mais complexos, como o caso da polimerização. Do melhor conhecimento da autora, os FP ainda não foram extensivamente testados neste contexto.

Em um trabalho pioneiro, Chen, Morris e Martin (2005) consideraram um processo de polimerização de metil metacrilato (MMA) em batelada e compararam o desempenho de estimação do EKF com um filtro de partículas auxiliar (ASIR-PF). Esses autores concluíram que os FP são ferramentas atraentes para aplicações que exigem a estimação de estado *on-line*, como monitoramento de processos, controle preditivo e retificação de dados.

Alguns anos mais tarde, Shenoy *et al.* (2011) também realizaram estudos considerando reatores de polimerização de metil metacrilato e compararam o desempenho do FP com o EKF e o Filtro de Kalman Unscented (UKF). Esses autores demonstraram que o FP foi superior ao EKF e UKF lidando com distribuições não Gaussianas em sistemas não-lineares realistas. Identificaram, ainda, que o FP se mostra menos robusto considerando um caso de diferença planta-modelo (*model mismatch*), mas essa limitação pode ser superada utilizando um método de *bootstrap*. Os autores propuseram uma atualização baseada nos filtros de Kalman para a geração da distribuição proposta que move as partículas para regiões de alta probabilidade. A variante do filtro de partículas resultante dessa modificação, quando considerado o UKF, é chamada Filtro de Partículas Unscented (UPF).

Em trabalho posterior, Shenoy *et al.* (2013) continuaram investigando a questão da incompatibilidade planta-modelo e sua influência na estimação de estado através de filtros baseados em atualizações de Kalman e filtros de partículas, considerando processos de polimerização. Investigaram também métodos de obtenção de estimação pontual a partir das distribuições dos FP. Eles concluíram que os filtros de partículas baseados em atualizações de Kalman são mais estáveis que o PF. Em relação aos métodos de estimação pontual, eles concluíram que é mais importante a robustez do estimador que o método para a extração das estimativas pontuais.

Os filtros de partículas também podem ser usados associados a outras estratégias de predição, como algoritmos de aprendizagem de máquinas. O trabalho de Montemerlo *et al.* (2002) avaliou o desempenho dos filtros de partículas para problemas de mapeamento e detecção de posição de robôs. Eles demonstraram que o desempenho do novo algoritmo proposto foi superior aos já existentes, inclusive quando considerado um número de partículas pequeno.

4.3. Comentários finais

Os modelos inferenciais configuram uma alternativa viável para a questão da indisponibilidade de instrumentos de medição. Os algoritmos matemáticos combinam as informações disponíveis com o modelo do processo e permitem a estimação de variáveis e parâmetros. Com o avanço tecnológico é crescente seu uso em conjunto com as estruturas de controle.

No cenário da polimerização, o filtro de Kalman estendido é a ferramenta mais utilizada, devido a sua simplicidade de implementação e capacidade de lidar com problemas não lineares. Entretanto, quanto maior a não-linearidade, maior seu erro. Desse modo, para sistemas complexos e altamente não lineares, como os processos de polimerização, esta não é a técnica mais indicada.

Os filtros de partículas são métodos alternativos ao EKF. Na literatura existem incontáveis trabalhos abordando estimação de estado e de parâmetros através de filtro de partículas; mas, no cenário de polimerização, as pesquisas ainda não os exploraram extensivamente para o monitoramento do processo. No entanto, são ferramentas potencialmente viáveis, pois não exibem fortes restrições para sua aplicação, como o KF e o EKF. Por exemplo, os FP podem ser usado em sistemas não-lineares e não Gaussianos, sem a necessidade de linearização e sem impor a

consideração de que a resposta do sistema siga uma distribuição probabilística específica. Desse modo, por serem menos rígidos, apresentam uma gama mais ampla de aplicações e foram abordados neste trabalho.

.

5 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS

Este capítulo apresenta uma visão geral sobre uma importante técnica de aprendizagem de máquinas: redes neurais (ou neuronais). Essas ferramentas, inspiradas no sistema nervoso biológico, apresentam uma estrutura não linear capaz de se adaptar a mudanças no ambiente e aprender por experiência. Essas e outras características impulsionam o seu uso para a modelagem de processos.

Os algoritmos de aprendizado de máquina são iterativos e "aprendem" através do reconhecimento de padrões a partir de dados observados. Quando expostos a um novo conjunto de dados, se adaptam de maneira automática. Seu leque de aplicações em Engenharia Química é extenso. São muito utilizados para modelagem de processos, identificação de falhas, estimação de variáveis, e etc. Dentre os muitos algoritmos existentes, podem-se destacar as redes neurais artificiais (RNA), os métodos baseados em máquina de vetores de suporte (SVM), os métodos de regressão por mínimos quadrados parciais (PSL) e os algoritmos de lógica *fuzzy*, que têm sido extensivamente utilizados nos últimos anos (CANETE *et al.*, 2012b; CRACKNELL; READING, 2014; BAS; VEDIDE; EGRIOGLU, 2016; ZHANG; LIU; ZHANG, 2016).

5.1. Redes Neurais Artificiais: Conceitos fundamentais

As RNA são algoritmos inspirados no sistema nervoso humano, ou seja, nas redes neurais biológicas - na capacidade de aprender a partir de seu ambiente e disponibilizar esse conhecimento para uso. São elementos processadores paralelamente distribuídos, constituídos por agrupamentos de unidades processadoras simples, os neurônios artificiais, interconectados e organizados em camadas (HAYKIN, 2001; PROTTESS, 2009). A Figura 8 exibe um esquema simplificado para o neurônio artificial.

Os sinais de entrada, provenientes do meio exterior (ou de outros neurônios anteriores), são multiplicados por seus respectivos pesos sinápticos, simulando a sinapse que ocorre no neurônio biológico. Após a multiplicação pelos pesos, as informações ponderadas são somadas e a resultante é modificada por uma função

de ativação, que gera o sinal de saída do neurônio artificial que é então transmitido a outro neurônio (ou para o meio exterior). O termo *bias* tem o efeito de aumentar ou diminuir a entrada líquida da função de ativação, dependendo se ele é positivo ou negativo, respectivamente (PROTTES, 2009; SILVA, 2014).

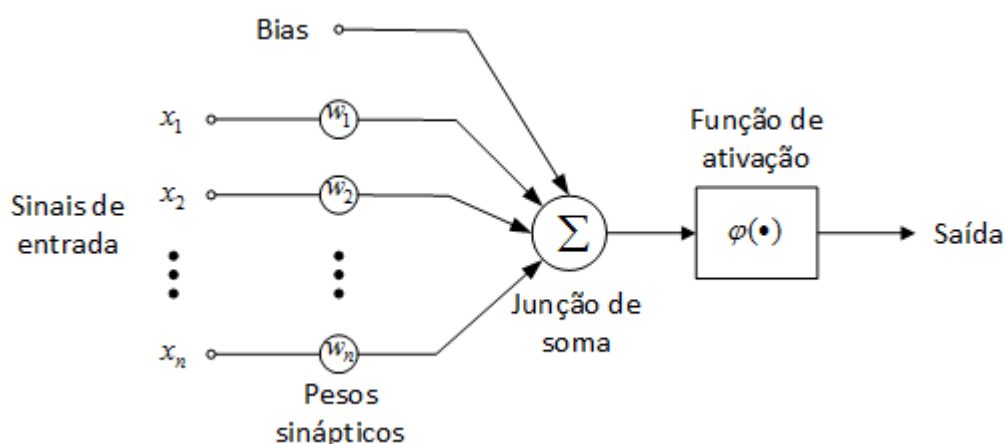


Figura 8 - Esquema simplificado de um neurônio artificial. Fonte: PROTTES, 2009.

Modificado pelo autor.

Uma rede neural funciona com vários neurônios organizados em grupos (ou camadas) sequenciados. Os dados são alimentados na camada de entrada e a resposta da rede ao seu efeito é observada na saída. Podem existir uma ou mais camadas, denominadas ocultas, entre a entrada e a saída da rede. O número de neurônios nas camadas de entrada e saída é determinado pelo número de atributos do padrão de entrada e de saída. Para as camadas intermediárias, esse número é definido empiricamente e varia de problema a problema (HAYKIN, 2001; CANETE *et al.*, 2012b; SANTANA, 2012; CRACKNELL; READING, 2014, SILVA, 2014). A Figura 9 exibe um esquema simplificado de uma rede neural artificial.

As informações podem ser propagadas em uma rede de duas formas: para frente – a partir dos neurônios de entrada, através dos neurônios escondidos (quando houver) para os neurônios de saída; ou para trás – a partir da saída de um neurônio da camada seguinte para um neurônio na camada anterior, ou mesmo para o próprio neurônio.

Uma rede é classificada como *feedforward* quando não trabalha com laços de informação, e como *feedback*, quando envolve a retroalimentação de informação

(PROTTES, 2008; SILVA, 2014). As Figuras 10 e 11 mostram a estrutura simplificada de redes *feedforward* e *feedback*.

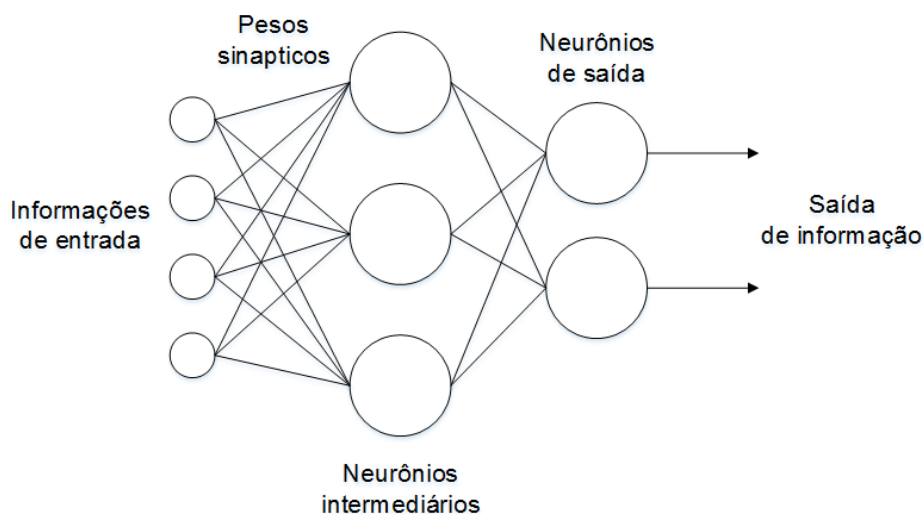


Figura 9 - Diagrama simplificado de uma rede neural artificial. Fonte: PIMENTEL (2005). Modificado pelo autor.

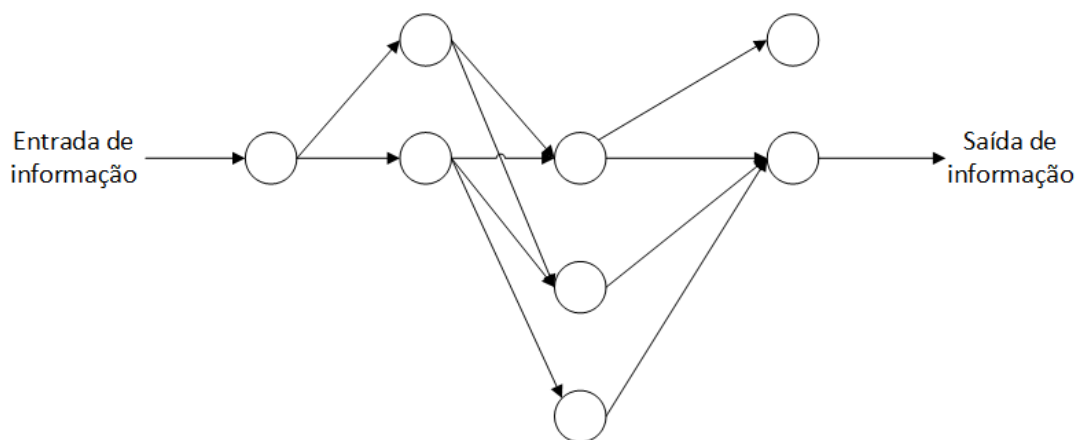


Figura 10 - Estrutura simplificada de redes *feedforward*.

As redes neurais exibem estrutura não linear e interligada, porém simples, e capacidade de aprendizagem e de auto-organização (adaptabilidade). Além disso, pode-se afirmar que são tolerantes a falhas, uma vez que danos a um neurônio não compromete o conjunto como um todo, apenas promove uma degradação suave do desempenho. Em virtude dessas características atrativas, essas estruturas são muito empregadas para a identificação de sistemas e modelagem de processos.

Para isso, é necessária uma etapa de treinamento (HAYKIN, 2001; PROTTEs, 2009; SILVA, 2014).

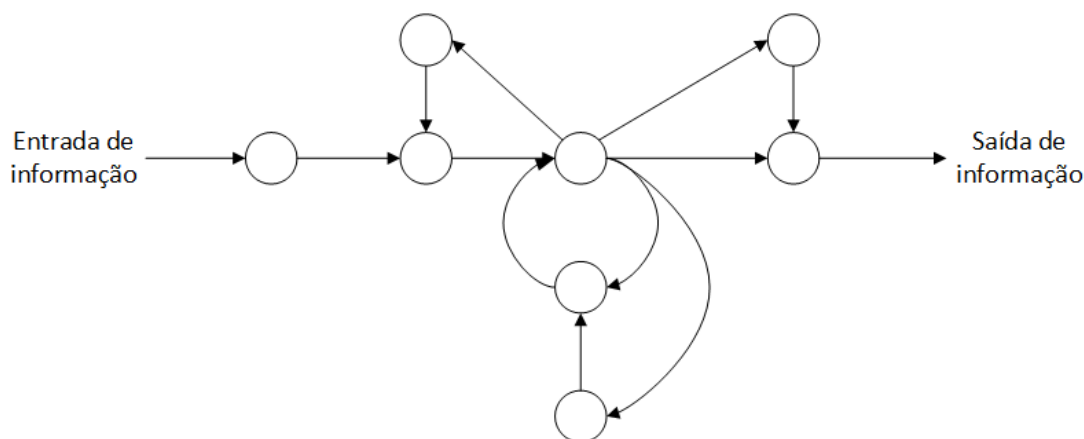


Figura 11 - Estrutura simplificada de redes *feedback*.

Durante a aprendizagem, também chamada de treinamento, a rede reconhece e extrai padrões relevantes do conjunto de informações recebido, estabelecendo uma representação própria do problema. Esse passo consiste no ajuste dos pesos sinápticos que conectam os neurônios e dos *biases*, e pode ser encarado como um problema de otimização (NOSE FILHO; LOTUFO; LOPES, 2008; PROTTEs, 2009; CRACKNELL e READING, 2014).

Existem duas abordagens para o treinamento de uma rede neural: supervisionada e não supervisionada. No primeiro caso, considera-se a presença de um “professor” que indica as relações entre as entradas e saídas. Para isso, são informados à rede conjuntos padrões de entrada e de saída para que ela identifique as relações relevantes e determine as saídas desejadas. Essa saída é então comparada com o conjunto de padrão e o erro gerado pelo cálculo da rede é minimizado com ajustes nos *biases* e pesos das conexões. Já com o aprendizado não supervisionado, a rede descobre os padrões nos dados de maneira autônoma e aprende a como refletir essa informação na sua saída (PROTTEs, 2009; SILVA, 2014).

Para essas tarefas de identificação de sistemas e modelagem de processos, as redes, devidamente treinadas, devem responder coerentemente diante de padrões desconhecidos. Vale destacar que, como qualquer modelo empírico, uma rede

neural não deve ser usada para condições operacionais externas a faixa utilizada para seu treinamento (SOARES, 2013).

Um grande desafio para a obtenção de modelos neurais é a definição de sua arquitetura, ou seja, número de camadas e neurônios. Redes de grandes arquiteturas são complexas e podem levar a casos de *overfitting*, ou seja, conseguem explicar bem demais apenas o conjunto de dados utilizados para treinamento. Nesse caso, a capacidade de generalização para além desse conjunto é prejudicada. Um outro problema pode surgir se a arquitetura da rede for muito simples, levando ao *underfitting*, já que a rede não consegue captar todas as relações relevantes entre os conjuntos de dados (PROTTES, 2009; SILVA, 2014). Para garantir uma boa capacidade de generalização, na maioria das vezes, o conjunto de dados padrão da rede é dividido em três grupos. O primeiro contempla um volume maior de dados e é utilizado na etapa de treinamento da rede. O segundo avalia a capacidade de generalização, que é a etapa de validação. O terceiro é utilizado para testar a rede (SILVA, 2014).

Existem diversos tipos de topologias de redes neurais, dentre as quais vale destacar as Redes *Perceptron* Multicamadas (MLP), que são as mais difundidas na literatura (SOARES, 2013) e são utilizadas nesse trabalho.

5.2. Redes *Perceptron* Multicamadas

As MLP são redes *feedforward* organizadas em uma camada de entrada, uma ou mais camadas escondidas e uma camada de saída. O algoritmo de treinamento geralmente utilizado é o *backpropagation*, que consiste em um método de aprendizagem pela correção do erro e envolve duas etapas: propagação e retropropagação (PROTTES, 2009).

Na etapa de propagação, o padrão de entrada se propaga pela rede, sempre para frente, de camada a camada, e gera uma saída. Os pesos e *biases* da rede são mantidos fixos. Na segunda etapa, esses parâmetros são reajustados de acordo com o sinal do erro entre a saída predita pela rede e a saída padrão (PROTTES, 2009; SANTANA, 2012; SILVA, 2014).

A grande vantagem de uma rede MLP é que, com uma única camada oculta, já permite a aproximação de qualquer função contínua, e com duas camadas, de qualquer função (PROTTES, 2009). Além disso, com as funções de ativação dos

neurônios e as sucessivas camadas, são capazes de incorporar as não-linearidades do problema a ser modelado.

A estrutura interconectada de uma rede neural permite que ela trate de processos altamente não-lineares, tornando-se uma ferramenta potencial e bastante atrativa para modelagem e controle de sistemas complexos, como o caso da polimerização. De fato, essas ferramentas foram, e ainda são, muito exploradas nesse contexto. Alguns exemplos de aplicações são apresentados a seguir.

5.3. Aplicações em sistemas de polimerização

Zhang *et al* (1998) propuseram uma rede neural artificial que prediz a trajetória das variáveis de qualidade em um processo em batelada de polimerização de metilmetacrilato com precisão, mesmo na presença de impurezas. Paralelamente, Meert e Rijckaer (1998) compararam diferentes tipos e arquiteturas de redes neurais para modelagem do comprimento da cadeia polimérica.

Nos anos seguintes, surgiram vários estudos envolvendo diferentes tipos de redes neurais, tais como *feedback*, *feedforward*, *fuzzy*, híbrida, etc., para modelagem, otimização e controle de sistemas de polimerização (HOSSEN *et al*, 2014).

Horn (2001) aproximou a dinâmica desconhecida de um sistema de polimerização em batelada a partir de uma rede neural, usando apenas as variáveis de estado medidas de uma batelada para o treinamento. Hanai *et al.* (2003) propuseram um modelo de rede neural *fuzzy* para estimar a razão de cis-polibutadieno, o índice de polidispersão desse polímero e a taxa de conversão.

Atasoy *et al.* (2006) estudaram um esquema de controle baseado em redes neurais para um processo contínuo de polimerização de acrilonitrila. Zhang (2008) também apresentou um modelo de RNA associado a uma estratégia de controle ótimo para um reator simulado de polimerização em batelada, considerando a presença de incompatibilidade planta-modelo e perturbações desconhecidas. Hossen *et al.* (2011) utilizaram um modelo baseado em RNA em um esquema de controle preditivo (NN-MPC) para estimar o comportamento futuro do processo em um horizonte de tempo específico. Esses autores compararam o desempenho de controle com um arranjo PID convencional e concluíram que o desempenho NN-MPC é superior.

Cunha, Souza Junior e Folly (2010) desenvolveram um sensor virtual baseado em RNA para a determinação do índice de fluidez e do teor de solúveis em xileno a partir de dados industriais de produção de polipropileno. Zhang e Liu (2013) também utilizaram um modelo baseado em uma rede neural tipo *fuzzy* para o monitoramento *on-line* do índice de fluidez em um processo de produção de polipropileno. Hosen *et al.* (2014) utilizaram um algoritmo de predição de intervalo baseado em redes neurais (PI-NN) para a modelagem de um reator de polimerização de estireno em batelada. Golzar, Amjad-Iranagh e Modarress (2016) testaram diferentes equações cúbicas de estado e uma rede neural artificial para prever as propriedades termodinâmicas de misturas de polímeros e solvente. Entretanto, esses autores não consideraram estratégias de redução de incerteza de medida associadas às ferramentas de estimação.

5.4. Comentários finais

As redes neurais artificiais são estruturas processadoras inspiradas na capacidade de processamento paralelo tolerante a falhas do sistema nervoso biológico. Exibem características excepcionais, tais como adaptabilidade e capacidade de mapeamento entrada-saída, além de serem facilmente montadas a partir da integração entre as unidades processadoras mais simples (neurônios). Por natureza são multivariáveis, permitindo lidar com problemas complexos e de dimensões elevadas, com múltiplas entradas e saídas. Em virtude dessas características atrativas, essas estruturas têm sido bastante aplicadas em processos de polimerização ao longo dos anos.

Entretanto, os modelos neurais “aprendem” através do reconhecimento de padrões a partir de dados observados e, quando esses dados são corrompidos por incertezas de medição, seu desempenho é prejudicado. Desse modo, sua utilização em conjunto com uma estratégia de redução de incerteza tem grande potencial de melhorar seu desempenho.

6 METODOLOGIA

Conforme apresentado nas seções anteriores, para a indústria de polimerização, o monitoramento é um passo crítico. Nem sempre existem ferramentas disponíveis para medição da maioria dos parâmetros de qualidade do produto final. Na ausência de tais dispositivos, análises *off-line* são realizadas em laboratórios. Entretanto, estes métodos são lentos e inviabilizam a ação de controle em virtude da baixa frequência das informações fornecidas. Uma alternativa bastante explorada ultimamente considera o uso de sensores inferenciais. Esses dispositivos fornecem o valor de variáveis latentes a partir de parâmetros operacionais com medição disponível. Nesse sentido, a presente seção apresenta o procedimento necessário para a implementação de um esquema de controle com um sensor virtual associado, composto por um filtro de partículas e uma rede neural, o qual é aplicado a um reator de polimerização de propeno simulado. Vale destacar que, durante a revisão bibliográfica para esta dissertação, não foram encontradas referências integrando redes neurais e filtros de partículas no contexto de polimerização, o que permite dizer que o procedimento aqui apresentado é uma contribuição inédita para a área de controle de sistemas de polimerização.

Em sistemas complexos, como o caso da polimerização, é muito difícil obter modelos que expliquem todos os fenômenos envolvidos no processo. Sempre há uma diferença de comportamento entre a planta real e o modelo. Devido a isso, neste trabalho foram considerados diferentes modelos na etapa de obtenção das medidas simuladas e no sensor virtual. Consideraram-se a definição de um modelo rigoroso para obtenção das medidas simuladas, a proposta de um modelo simplificado para a implementação do filtro de partículas *on-line* e a criação de uma rede neural para a estimação dos parâmetros de qualidade do polímero. Desse modo, as incertezas das medições disponíveis, tais como temperaturas, vazões e volume da mistura reacional, foram reduzidas, e o MI e o XS, considerados aqui latentes, foram estimados a partir dessa informação melhorada.

6.1. Definição do modelo rigoroso

O sistema estudado neste trabalho foi baseado no modelo proposto por Dutra *et al.* (2014), que considerou a polimerização em massa de propeno com alimentação de monômero líquido puro em CSTR operando a alta pressão - tecnologia LIPP. Assume-se que:

- Propeno líquido é utilizado como meio de suspensão para as partículas de polímero;
- A desativação do catalisador Ziegler-Natta ocorre;
- Trietilalumínio (TEA) e benzoato de para-etoxi etilo (PEEB) são utilizados como aditivos;
- Hidrogênio participa como agente de transferência de cadeia;
- Como a polimerização é extremamente exotérmica, um condensador de topo controla a temperatura do reator.

Dutra *et al.* (2014) não consideraram o reaproveitamento de propeno não reagido, que é uma parcela significativa da corrente de saída do processo, pois a conversão de reação dificilmente ultrapassa 45%. Isso serve para se evitar efeitos adversos, como o aumento da viscosidade do meio reacional que influencia negativamente na troca térmica do reator. Entretanto, a questão do reciclo material foi abordada por Dias, Dutra e Silva (2016b). Esses autores consideraram que a corrente de saída do reator (\dot{m}_s), que é uma lama composta por polímero (\dot{m}_{pol}) e monômero não reagido, passa através de um separador líquido-vapor tipo *flash*. Depois, após a compressão, retorna como um líquido para o reator por uma corrente de reciclo (\dot{m}_{rec}), combinada com a alimentação monômero fresco (\dot{m}_M), que é utilizada para atingir a taxa de produção desejada.

É importante destacar as variáveis operacionais e de qualidade do polímero para o reator. Normalmente, a taxa de polimerização é controlada ajustando-se a temperatura do reator, e a produtividade, pela manipulação da corrente de alimentação de catalisador. Em relação à qualidade do polímero, a rigidez do polímero e o tamanho da cadeia, que estão relacionados com XS e MI, são definidos respectivamente pelas taxas de alimentação de aditivos (TEA e PEEB) e hidrogênio gasoso, no caso de se utilizarem catalisadores Ziegler-Natta. Além disso, a temperatura do condensador e o volume e a temperatura do reator são mantidos pela manipulação das taxas: de alimentação do refrigerante para o condensador, de

saída de lama do reator e de monômero condensado. Para evitar a instabilidade que a inserção da corrente de reciclo pode promover, a alimentação do monômero do reator (\dot{m}_{Comb}) é mantida constante, pela manipulação da corrente de alimentação de monômero fresco.

Um fluxo simplificado para este processo de polimerização é mostrado na Figura 12.

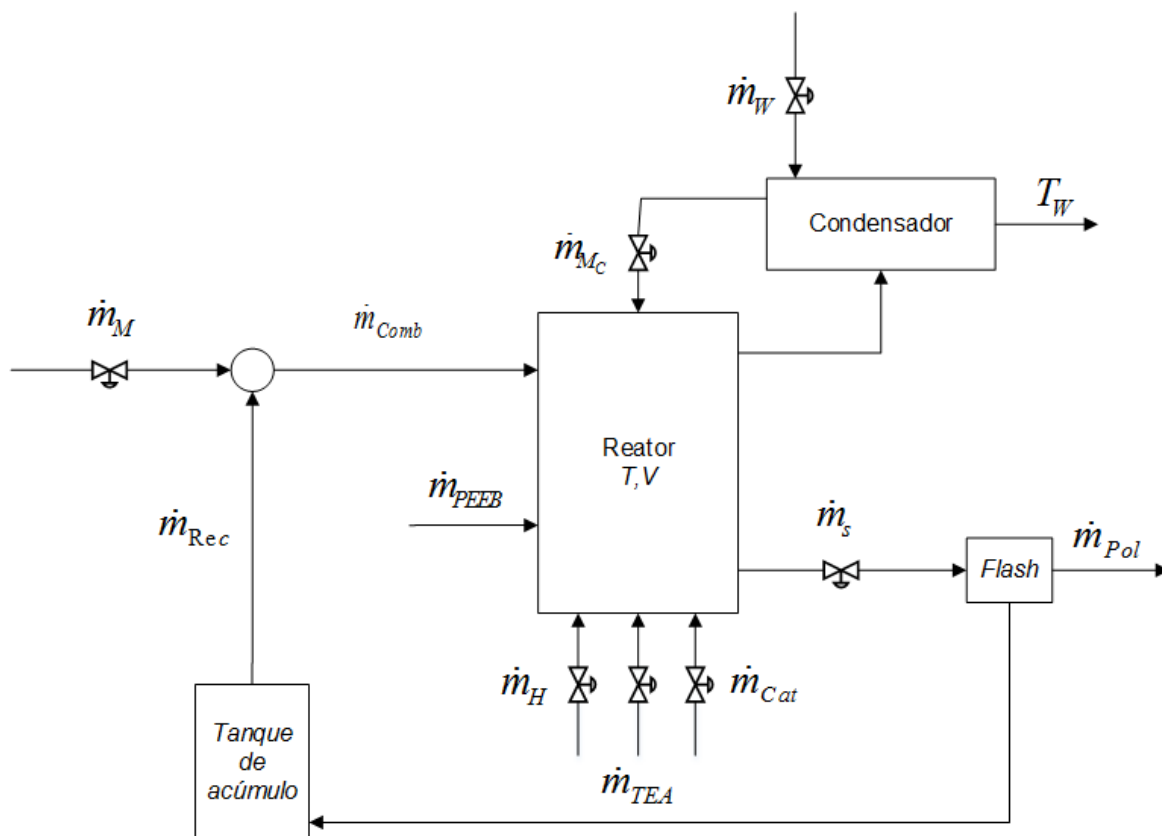


Figura 12 - Fluxograma simplificado do processo.

Neste esquema, \dot{m}_{TEA} , \dot{m}_{PEEB} , \dot{m}_H e \dot{m}_{Cat} indicam as correntes de alimentação de TEA, PEEB, hidrogênio e catalisador, respectivamente. \dot{m}_{Mc} representa a vazão de monômero aquecido que é enviada para o condensador e retorna arrefecida para o reator, \dot{m}_W e T_W , a vazão e a temperatura de líquido refrigerante, que auxilia na troca térmica no condensador.

As contribuições de Dutra *et al.* (2014) com a proposta da integração mássica de Dias, Dutra e Silva (2016b) foram combinadas resultando no modelo do processo que é utilizado aqui para a obtenção das medidas simuladas e que está representado nas Equações 5 – 24.

Balanço de massa global:

$$\rho \cdot \frac{dV}{dt} = \dot{m}_{comb} + \dot{m}_H + \dot{m}_{TEA} + \dot{m}_{PEEB} - \dot{m}_s \quad (5)$$

Nesta equação, ρ representa a densidade do meio e V o volume da mistura reacional.

Balanço de massa para o monômero:

$$\rho \cdot \frac{d(V \cdot M)}{dt} = \frac{\dot{m}_{Comb} - W_M \cdot \dot{m}_s}{PM_M} - V \cdot M \cdot (k_p + k_{tm}) \cdot Cat \quad (6)$$

Nesta representação, M , W_M e PM_M são, respectivamente, a concentração, a fração e o peso molar do monômero no reator.

Balanço de massa para o catalisador:

$$\rho \cdot \frac{d(V \cdot Cat)}{dt} = \dot{m}_{Cat} - \frac{\dot{m}_s}{\rho} \cdot Cat - V \cdot k_d \cdot Cat \quad (7)$$

Na expressão (7), Cat e k_d indicam a concentração e a constante cinética de desativação do catalisador

Balanço de massa para o hidrogênio

$$\rho \cdot \frac{d(V \cdot H_2)}{dt} = \frac{\dot{m}_H}{PM_H} - \frac{\dot{m}_s}{\rho} \cdot H_2 - V \cdot H_2 \cdot k_{tH} \cdot Cat \quad (8)$$

Nesta equação, PM_H e H_2 representam o peso molar e a concentração de hidrogênio, e k_{tH} a constante cinética de transferência de cadeia por hidrogênio

Balanço de massa para o polímero

$$\frac{dPol}{dt} = R_{Pol} - \dot{m}_{Pol} \quad (9)$$

O termo R_{Pol} indica a taxa de polimerização e Pol a massa de polímero no reator.

Balanço de massa para os aditivos

$$\frac{dTEA}{dt} = \dot{m}_{TEA} - \frac{TEA}{Pol} \cdot \dot{m}_{Pol} \quad (10)$$

$$\frac{dPEEB}{dt} = \dot{m}_{PEEB} - \frac{PEEB}{Pol} \cdot \dot{m}_{Pol} \quad (11)$$

Nesta representação, TEA e $PEEB$ são, respectivamente, as massas de aditivos TEA e $PEEB$.

Taxa de reação:

$$R_{Pol} = -PM_m \cdot V \cdot M \cdot k_p \cdot Cat \quad (12)$$

O termo k_p indica a constante cinética de propagação de cadeia.

Balanco de massa nos divisores de corrente:

$$\dot{m}_{Rec} = W_M \cdot \dot{m}_s \quad (13)$$

$$\dot{m}_{Pol} = (1 - W_M) \cdot \dot{m}_s \quad (14)$$

Densidade do meio reacional:

$$\rho = W_M \cdot \rho_M + W_{Pol} \cdot \rho_{Pol} \quad (15)$$

Em que ρ_M e ρ_{Pol} são, respectivamente, as densidades do monômero e do polímero.

Balancos de momentos dos polímeros vivo e morto:

$$\frac{d\lambda_0}{dt} = \frac{dCat}{dt} \quad (16)$$

$$\frac{d(V \cdot \lambda_1)}{dt} = -\frac{\dot{m}_s}{\rho} \cdot \lambda_1 + V \cdot [k_p \cdot M \cdot Cat - (k_{th} \cdot H_2 + k_{ts} + k_d) \cdot \lambda_1] \quad (17)$$

$$\frac{d(V \cdot \lambda_2)}{dt} = -\frac{\dot{m}_s}{\rho} \cdot \lambda_2 + V \cdot [k_p \cdot M \cdot (Cat + 2 \cdot \lambda_1) - (k_{th} \cdot H_2 + k_{ts} + k_d) \cdot \lambda_2] \quad (18)$$

$$\frac{d(V \cdot \mu_k)}{dt} = -\frac{\dot{m}_s}{\rho} \cdot \mu_k + V \cdot (k_{th} \cdot H_2 + k_{ts} + k_d) \cdot \lambda_k \quad (19)$$

Em que λ_0 , λ_1 , λ_2 , e λ_k são, respectivamente, os momentos de ordem zero, um, dois e k de uma distribuição de tamanhos de cadeia de um polímero vivo. μ_k é o momento de ordem k de uma distribuição de tamanhos de cadeia de um polímero morto.

Balanco de energia no reator

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{m}_M \cdot c_{p,M}(T_e) \cdot (T_e - T) + (-\Delta H) \cdot R_{Pol} - Q_1}{PM_M \cdot c_{p,M}(T) \cdot V \cdot M + c_{p,Pol}(T) \cdot Pol} \quad (20)$$

$$Q_1 = \dot{m}_{Mc} \cdot [c_{p,M}(T) \cdot (T - T_c) + \lambda_M(T)] \quad (21)$$

Em que $c_{p,M}$ e $c_{p,Pol}$ são, respectivamente, os calores específicos do monômero e do polímero; T_e , a temperatura de alimentação do monômero; T e T_c , as temperaturas de saída do reator e do condensador; Q_1 , a quantidade de calor total retirada pelo condensador de topo. ΔH é o calor de reação e λ_M é o calor latente de vaporização do monômero.

Equação para a temperatura do condensador

$$\frac{dT_c}{dt} = \frac{Q_1 - Q_2}{M_{c,W} \cdot c_{p,W}(T_W)} \quad (22)$$

Equação para a temperatura da camisa

$$\frac{dT_W}{dt} = \frac{\dot{m}_W \cdot c_{p,W}(T_{W,e}) \cdot (T_{W,e} - T_W) + Q_2}{M_{c,W} \cdot c_{p,W}(T_W)} \quad (23)$$

$$Q_2 = UA \cdot (T_c - T_W) \quad (24)$$

Nas Equações (22) – (24), $T_{W,e}$ representa a temperaturas de entrada água na camisa de refrigeração; M_c e $M_{c,W}$, as massas de monômero e de água, respectivamente, no condensador e na camisa, admitidas constantes; $c_{p,W}$, o calor específico da água; UA , o coeficiente global de transferência de calor; Q_2 , a quantidade de calor total retirada pela camisa de refrigeração do condensador.

Para obter informações mais detalhadas sobre o modelo, o leitor interessado é encorajado a consultar as referências originais (DUTRA *et al.*, 2014; DIAS, DUTRA e SILVA, 2016b).

De modo a quantificar as propriedades finais do polímero, dadas em termos de médias, tais como pesos moleculares médios numérico e mássico (respectivamente, M_n e M_w), índice de polidispersão (PD), MI, XS, etc., devem ser tomadas correlações. Geralmente, estas propriedades são calculadas com base nos balanços de momento estatísticos das cadeias de polímeros vivos e mortos. Neste trabalho, foram estudadas somente o MI e o XS.

O índice de fluidez fornece uma ideia da facilidade do polímero em fluidez quando fundido. Pode ser calculado a partir de correlações empíricas, conforme dado pela Equação 25 (LATADO *et al.*, 2001), na qual a_1 e a_2 são constantes.

$$\log(MI) = a_1 \cdot \log(M_w) + a_2 \quad (25)$$

O teor de solúveis em xileno está relacionado com a fração de material atático na resina polimérica, fornecendo informação sobre a rigidez do material, e pode ser calculado a partir da Equação 26 (MACHADO e PINTO, 2011). A variável R_p é a taxa de reação do polímero vivo, e XS^R e K_{XS} são parâmetros.

$$\frac{dXS}{dt} = \frac{R_p}{Pol} \cdot \left[XS^R + K_{XS} \cdot \left(\frac{TEA}{PEEB} - 1 \right) - XS \right] \quad (26)$$

A representação matemática desse reator resultou então em um modelo não-linear dinâmico rigoroso composto por 17 equações diferenciais combinadas com 48 equações algébricas. Esse conjunto de equações foi utilizado neste trabalho para simular o funcionamento do reator de polimerização de propeno, no lugar da planta real. O modelo foi implementado no *software* Matlab em um computador com processador Intel® Core i7™. A rotina de integração utilizada foi a *ode15s.m*, que utiliza métodos de diferenciação numérica (NDF) adequados para problemas rígidos (*stiff*), como a polimerização de propeno, em que as mudanças dinâmicas associadas a algumas variáveis, como as espécies catalíticas intermediárias, são muito mais rápidas que às referentes aos demais estados do modelo

6.2. Simplificação do modelo

Um modelo simplificado do processo foi utilizado para demonstrar a confiabilidade do algoritmo de filtro de partículas contra a diferença entre modelo e planta, conhecida como *plant-model mismatch*, e também para evitar o uso do mesmo modelo para gerar as medidas simuladas e obter os valores estimados - o que é bem conhecido como crime inverso (KAPIO e SOMERSALO, 2004). Para isso, considerou-se rápida a dinâmica da camisa de resfriamento do reator e os balanços de momento estatístico de polímero vivos e mortos foram desprezados. Foi utilizada uma técnica de aprendizagem de máquinas com aprendizagem supervisionada, nomeadamente uma rede neural, para obtenção dos parâmetros de qualidade da resina: índice de fusão (MI) e do teor de solúveis em xileno (XS).

Para o projeto do modelo neural, foi utilizado o *Neural Network Toolbox* do *software* Matlab R2011b, que fornece algoritmos e funções para a criação, treinamento e validação de redes neurais. As variáveis que têm efeito sobre MI e XS foram determinadas pelo conhecimento do processo.

Geralmente, as propriedades finais da resina polimérica são calculadas com base nos balanços de momento estatístico das cadeias de polímero vivo e morto. Esta técnica de momentos permite o cálculo de determinadas propriedades a partir dos balanços de massa das espécies presentes no sistema, ou seja, monômero, hidrogênio, catalisadores, cocatalisadores e polímero.

Assim, a temperatura do reator, que influencia na atividade catalítica, a massa de monômero e de hidrogênio na mistura reacional e a produtividade têm efeito direto no peso molecular médio mássico de um polímero e, conseqüentemente, em seu índice de fluidez. Então, estas quatro variáveis foram consideradas como informações de entrada para rede para obtenção do MI. Mas, como as massas de monômero e hidrogênio geralmente não são medidas em linha, consideram-se, em substituição, as suas vazões de alimentação.

Por sua vez, o teor de solúveis em xileno está relacionado com a fração de material atático na resina, e é influenciado diretamente pelas massas dos aditivos trietil-alumínio e para-etoxi-etil-benzoato e do polímero. Desse modo, as vazões de alimentação de TEA, PEEB e de polímero produzido foram consideradas informações de entrada para a obtenção de XS.

Os dados de entrada e saída utilizados no treinamento da rede neural foram retirados de simulações (x_{exa}) e corrompidos por um número aleatório que segue uma distribuição Gaussiana com média nula e desvio padrão de 5% do valor nominal da variável (x_{nom}), como mostra a Equação (27).

$$x_i = x_{exa} + N(0, 0.05 \cdot x_{nom}) \quad (27)$$

Os padrões de entrada e saída foram normalizados em relação aos seus valores máximos e mínimos para garantir que a diferença de magnitude entre as variáveis não influencie negativamente no desempenho da rede. Para a captação de dados, o controle MI e XS foi considerado em malha aberta e o processo foi simulado considerando-se o modelo rigoroso. A normalização foi realizada de acordo com a Equação 28, fornecida por Cunha, Souza Júnior e Folly (2010).

$$N_{n,i} = 0.8 \frac{(x_i - x_{\min,i})}{(x_{\max,i} - x_{\min,i})} + 0.1 \quad (28)$$

Nesta equação $N_{n,i}$ e x_i representam a variável normalizada e original. $x_{\min,i}$ e $x_{\max,i}$ são os valores mínimos e máximos dessa variável.

A expressão 28 foi escolhida como forma de evitar os valores extremos, 0 e 1, no treinamento da rede. Desse modo, os padrões de entrada e saída ficaram distribuídos entre 0,1 e 0,9.

Uma rede neural artificial *feedforward* foi gerada e treinada. Várias arquiteturas com uma camada escondida, considerando diferentes funções de ativação e número de neurônios, foram testadas ao longo das simulações e avaliadas em termos do SD^{RATIO} , que relaciona o desvio-padrão do erro de predição e o desvio-padrão do conjunto de dados original, e do coeficiente de determinação (R^2). Para a etapa de treinamento, utilizou-se o método de otimização de Levenberg-Marquardt em uma estratégia de validação cruzada que treina a rede de maneira iterativa. Os parâmetros empregados, definidos empiricamente, estão mostrados na Tabela 1. O número de épocas máximo representa o número de vezes que um padrão é apresentado a rede e a taxa de aprendizado é utilizada para atualizar os pesos e *biases*.

Tabela 1 - Parâmetros de treinamento das redes *Perceptron* Multicamadas.

Número máximo de épocas	200
Erro final desejado	0
Taxa de aprendizado	10^{-3}

A Tabela 2 apresenta as funções de ativação testadas para as camadas oculta e de saída. As redes são identificadas em função do tipo, MLP (*Perceptron* multicamadas), do número de padrões de entrada, do número de neurônios da camada escondida e do número de padrões de saída.

Os padrões da rede foram divididos em três conjuntos: treinamento (70% do volume de dados), validação (20%) e teste (10%). As etapas de treinamento e validação influenciam nos valores dos pesos da rede, já a etapa de teste avalia a capacidade de generalização do modelo quando considerado um novo conjunto de dados.

A verificação da rede foi realizada pela comparação dos dados padrões simulados e os estimados utilizando-se dois critérios: o SD^{RATIO} e o Coeficiente de determinação (R^2). O SD^{RATIO} é a razão entre o desvio padrão do erro de predição e o desvio padrão do conjunto original de dados. Quanto mais próximo de zero ele for, mais precisa será a estimativa. Segundo CUNHA, SOUZA JUNIOR e FOLLY (2010),

valores abaixo de 0,2 são considerados bons. O R^2 indica o quão bem um modelo consegue explicar os valores observados e quanto mais próximo de 1, melhor o desempenho de estimação.

Tabela 2 - Funções de ativação testadas para as camadas oculta e de saída.

RNA	Camada oculta	Camada de saída
MLP 6-2-2	Hiperbólica	Linear
MLP 6-2-2	Sigmoide	Linear
MLP 6-5-2	Hiperbólica	Sigmoide
MLP 6-8-2	Hiperbólica	Sigmoide
MLP 6-8-2	Hiperbólica	Linear
MLP 6-10-2	Sigmoide	Hiperbólica
MLP 6-10-2	Hiperbólica	Sigmoide
MLP 6-10-2	Sigmoide	Linear
MLP 6-15-2	Sigmoide	Linear
MLP 6-15-2	Sigmoide	Sigmoide

Para avaliar o desempenho do modelo simplificado, foi também considerado um passo de verificação baseado na comparação dos resultados obtidos com ambos os modelos de processo (rigoroso e simplificado).

6.3. Implementação do filtro de partículas *on-line*

Duas camadas hierárquicas compõem o sistema de controle PI (Proporcional-Integral) para o processo de polimerização de propeno. A camada primária (controle supervisor) garante o cumprimento das especificações de qualidade da resina e inclui as malhas do MI e XS. A camada secundária (controle regulatório) garante a estabilidade da operação, atenua os efeitos das perturbações e inclui as malhas para o volume e temperatura do reator, temperatura do fluido refrigerante, taxa de

produção de polímero e de alimentação de monômero. Os tempos de amostragem para as camadas regulatórias e supervisórias considerados foram, respectivamente, 1 e 10 minutos. Este sistema de controle é baseado na configuração *feedback*, de modo que o monitoramento do processo é uma etapa importante. Neste sentido, este trabalho considera a existência de variáveis latentes e que todas as medições disponíveis apresentam incertezas, como visto em sistemas de produção reais, sendo assim, um cenário que estimula o uso de ferramentas de estimação.

Desse modo, para avaliar o impacto das incertezas no controle do processo, no instante de tempo $t = 60h$, aplicou-se um degrau regularizado de magnitude $10\text{ }^{\circ}\text{C}$ na temperatura de alimentação do monômero (teste regulador) e outro de magnitude 2 no *set point* de XS (teste servo), considerando-se dois casos: (1) um sistema ideal (medições sem ruído) considerando valores exatos; e (2) um sistema mais realista, assumindo ruído gaussiano com média zero e desvio padrão de 5% para os dados exatos simulados (y_{exa}).

Na maioria das aplicações práticas, as informações sobre as incertezas de medição não estão disponíveis. Prata (2009) faz a caracterização das variâncias dos erros de medição para o processo de polimerização em massa de propeno considerando a tecnologia LIPP. O nível de incerteza considerado (5% do valor exato) neste trabalho é superior ao determinado por Prata (2009) e foi intencionalmente selecionado para avaliar o desempenho da ferramenta proposta diante de informações com baixa qualidade. A Equação 29 indica como foram obtidas as medidas simuladas. Nesta representação, y_{exa} corresponde ao valor previsto pelo modelo rigoroso. Para esta primeira etapa de comparação, todas as variáveis foram consideradas medidas em linha.

$$y_m = y_{exa} + N(0, 0.05 \cdot y_{exa}) \quad (29)$$

Avaliou-se também o desempenho do controlador na presença de um filtro Bayesiano SIR. Neste caso, antes do cálculo da ação de controle (Δu_k), as variáveis de processo são estimadas - isto é, o ruído das medições deve ser reduzido e as variáveis latentes obtidas através do sensoriamento virtual, que fornece y_{est} , como mostrado na Figura 13. As ações controle são calculadas com base no algoritmo de velocidade PI (DUTRA *et al.*, 2014).

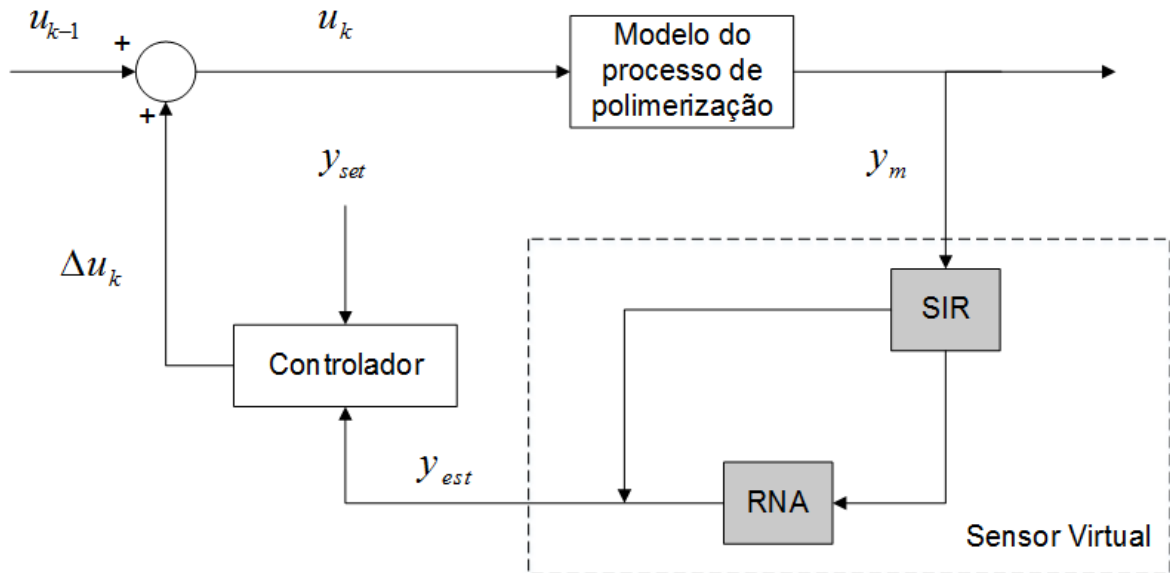


Figura 13 - Representação esquemática do sistema de controle feedback baseado em sensores virtuais.

Os filtros foram testados com diferentes números de partículas (10, 50, 100 e 200) e níveis de incerteza para a evolução dos estados (1%, 5% e 10%). A configuração que apresentou melhor desempenho foi selecionada para uso associado com a rede neural e as estruturas de controle. Foi considerado um intervalo de credibilidade de 99% calculado para cada tempo de amostragem pelas Equações 30 e 31.

$$L_{\text{inf}} = y_{\text{est}} - 2,576 \cdot \sigma_{\text{est}} \quad (30)$$

$$L_{\text{sup}} = y_{\text{est}} + 2,576 \cdot \sigma_{\text{est}} \quad (31)$$

Nestas equações, L_{inf} e L_{sup} são os limites de credibilidade inferior e superior; e σ_{est} representa a incerteza das partículas.

Para avaliar o desempenho do filtro, propõe-se nesta dissertação a determinação da largura máxima do intervalo de credibilidade (MWCI), em vez de usar o bem conhecido erro médio quadrático (RMSE). As métricas fornecidas pelo RMSE refletem o desempenho médio do filtro ao longo do tempo com base no valor real da variável, o que não é possível para os processos químicos em geral. Em contrapartida, o MWCI avalia a performance global de estimação com base nas

variáveis estimadas, algo mais consistente para utilização em tempo real. Além disso, vale a pena afirmar que quanto mais estreita é a largura do intervalo, mais precisa é a estimação do filtro de partículas, uma vez que as partículas têm uma faixa mais limitada de valores considerados aceitáveis, estando mais próximos dos valores reais.

O cálculo da largura máxima foi realizado para cada variável estimada, nomeadamente: volume da reação, temperaturas do reator e do condensador, e a corrente de alimentação de monômero. Por levar em conta apenas os valores estimados, esse fator se apresenta promissor, mas deve ser considerado com cautela. Quando a degeneração das partículas acontece, a espessura do intervalo de credibilidade diminui drasticamente. Se esta degeneração ocorrer com frequência, o valor MWCI fica comprometido e pode levar a conclusões errôneas sobre a qualidade da estimativa.

Uma forma de avaliar a presença deste efeito negativo é considerar o tamanho efetivo da amostra (N_{eff}), isto é, o número de partículas capazes de aproximar a distribuição de estado a posteriori (ARULAMPALAM *et al.*, 2002). O N_{eff} pode ser determinado pela Equação 32 (KONG; LIU; WONG, 2000). Se apresentar um valor pequeno, indica degeneração severa. Assim, este parâmetro também é avaliado, juntamente com o MWCI, para garantir a escolha do filtro de partículas com melhor desempenho.

$$N_{eff} = \frac{N}{1 + Var(w_k^i)} \quad (32)$$

Nesta equação, N representa o número de partículas

Finalmente, para avaliar o desempenho do esquema de controle proposto, foram realizados testes servo e regulador, incluindo mudanças no *set point* do MI e XS e na temperatura de alimentação do monômero.

7 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Este capítulo apresenta os principais resultados de todas as etapas desse trabalho de pesquisa, acompanhados de uma discussão sobre seus significados

7.1. Simplificação do modelo

Como forma de evitar o crime inverso e avaliar o desempenho da ferramenta proposta diante de um caso de *plant-model mismatch*, o modelo rigoroso foi simplificado. Assim, a Equação 23 do modelo rigoroso foi substituída pela Equação 34, obtida a partir da consideração mostrada na Equação 33.

$$\frac{dT_w}{dt} = 0 \quad (33)$$

$$T_w = \frac{\dot{m}_w \cdot c_{p,w}(T_{we}) \cdot T_{we} + UA \cdot T_c}{\dot{m}_w \cdot c_{p,w}(T_{we}) + UA} \quad (34)$$

Para o treinamento da rede foram considerados 200 pontos simulados, corrompidos por uma incerteza de 5% do valor nominal de cada variável. A Figura 14 mostra a distribuição dos dados padrões normalizados utilizados, para o índice de fluidez e teor de solúveis em xileno.

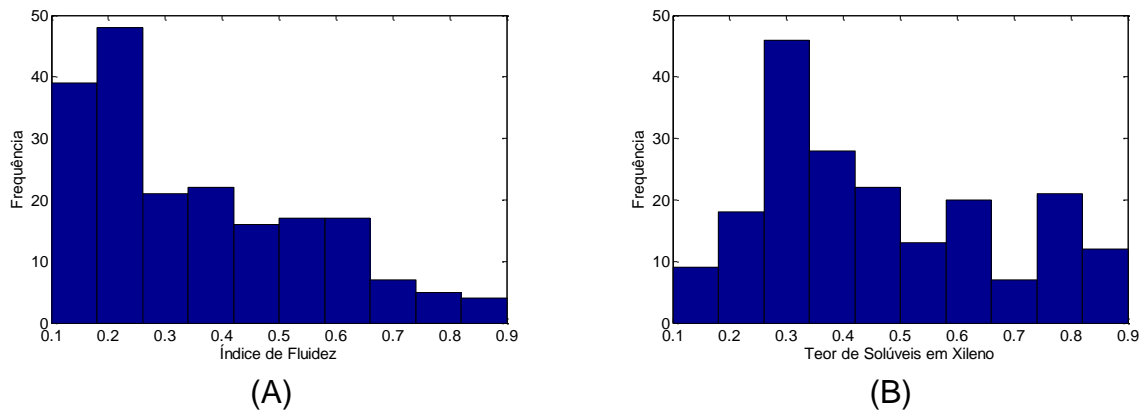


Figura 14 - Distribuição dos dados padrões normalizados: A) Índice de Fluidez; e B) Teor de Solúveis em Xileno.

Pode ser observado que os dados de XS estão mais distribuídos no intervalo considerado, enquanto para o caso do MI, os dados estão concentrados nos primeiros 60% da faixa considerada. Isso não é o ideal para o treinamento de uma rede, uma vez que uma parcela dos dados não é bem representada. Entretanto, a região de maior volume de dados, ou seja, melhor representada pela rede, é a região de operação desejada. Desse modo, o desempenho do esquema de controle com a rede não é prejudicado pela não uniformidade dos padrões de treinamento.

A Tabela 3 mostra o desempenho das 10 melhores redes testadas, ordenadas e concordância com a Tabela 2. De acordo com o SD^{RATIO} da estimação e o coeficiente de determinação para as etapas de validação e teste da rede, que indicam a capacidade de generalização do modelo, a rede que apresentou melhor desempenho (destacada em negrito nas Tabelas 2 e 3) foi a MLP 6-10-2. Sua arquitetura considera 10 neurônios e função de ativação hiperbólica na camada oculta e 2 neurônios na camada de saída com função de ativação sigmoide.

Tabela 3 - Desempenho das melhores redes testadas.

RNA	R^2 Treinamento	R^2 Validação	R^2 Teste	R^2 Total	SD^{RATIO}
MLP 6-2-2	0,8419	0,8738	0,7791	0,8409	0,2882
MLP 6-2-2	0,8468	0,8463	0,7812	0,8356	0,2989
MLP 6-5-2	0,9769	0,9281	0,8153	0,9479	0,1660
MLP 6-8-2	0,9561	0,9529	0,8259	0,9369	0,1859
MLP 6-8-2	0,9096	0,9273	0,8733	0,9073	0,2261
MLP 6-10-2	0,9765	0,9671	0,8969	0,9631	0,1518
MLP 6-10-2	0,9804	0,9673	0,9718	0,9772	0,1363
MLP 6-10-2	0,9658	0,9382	0,9642	0,98093	0,1673
MLP 6-15-2	0,9748	0,9439	0,7820	0,9396	0,2013
MPL 6-15-2	0,9742	0,9344	0,8356	0,9464	0,1493

A Figura 15 mostra os resultados obtidos para o treinamento, validação e teste dessa rede, comparando valores reais (conjunto padrão) e estimados. É possível observar que os valores estimados seguiram a tendência dos valores padrões, confirmando o bom desempenho indicado pelo SD^{RATIO} e pelo coeficiente de determinação. Vale ressaltar que esse bom desempenho, nas três etapas: treinamento, validação e teste, demonstram que o modelo neural apresenta um bom equilíbrio na precisão e na capacidade de generalização, não sendo prejudicado pela não uniformidade dos dados de treinamento. Com este resultado promissor, a rede neural foi adicionada ao modelo de processo e substituiu as correlações iniciais de propriedade final.

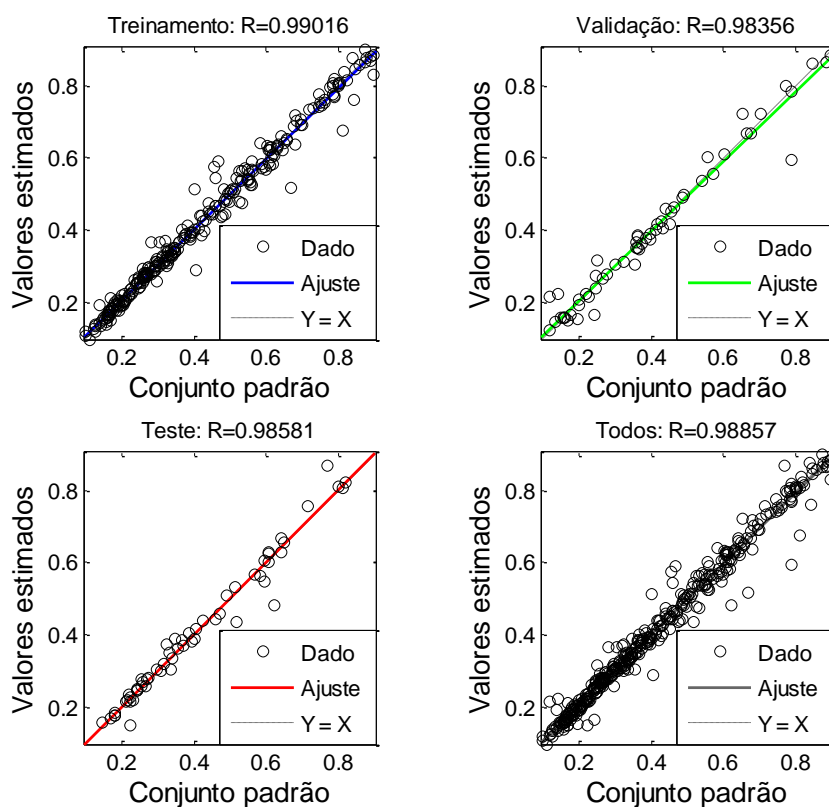


Figura 15 - Comparação entre os valores estimados e padrão para a rede de melhor desempenho.

Na sequência, foi avaliado então o comportamento dinâmico em malha fechada do novo modelo (simplificado) em relação ao modelo rigoroso. As variáveis controladas foram reguladas em torno de suas condições nominais e, no instante de tempo

$t = 60h$, consideraram-se mudanças na temperatura de alimentação do monômero (teste regulador) e no *set point* de XS (teste servo). Para esta primeira análise dinâmica não foram considerados ruídos de medição, nem a indisponibilidade de instrumentos. O objetivo foi verificar a qualidade preditiva do modelo simplificado. As Figuras 16-19 mostram o comportamento dinâmico obtido para a temperatura e volume do reator, índice de fluidez e teor de solúveis em xileno com suas respectivas variáveis manipuladas.

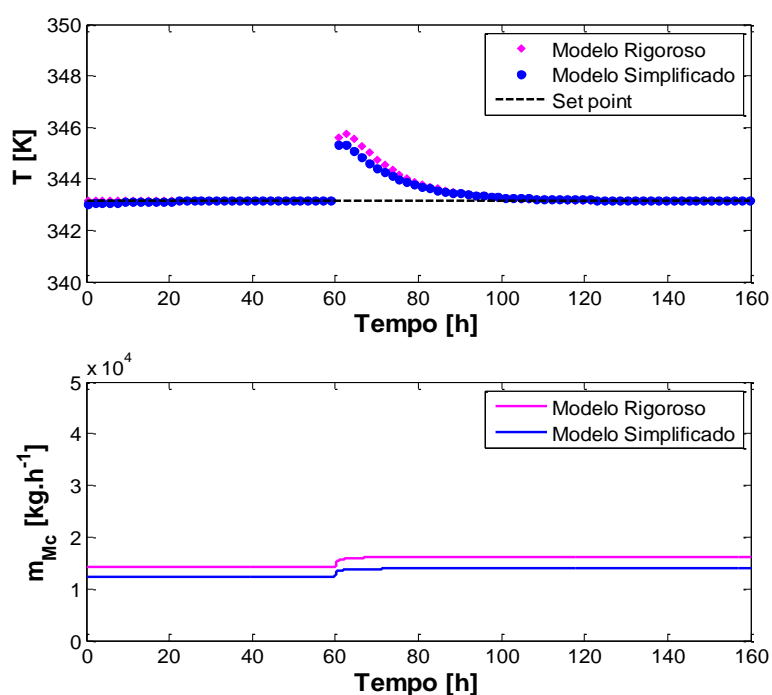


Figura 16 - Comparação da temperatura do reator e taxa de condensação para os modelos rigoroso e simplificado.

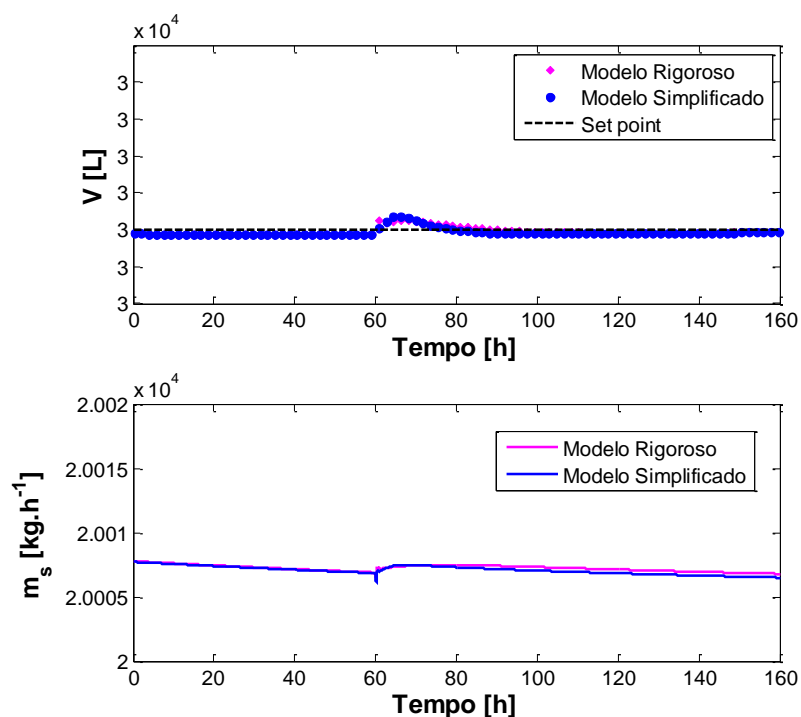


Figura 17 - Comparação do volume do reator e da vazão de saída de lama para os modelos rigoroso e simplificado.

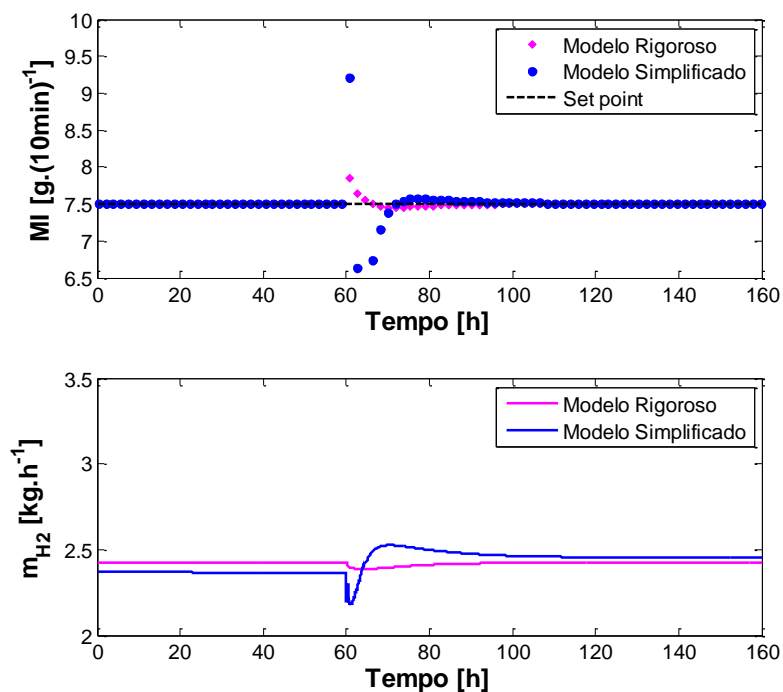


Figura 18 - Comparação do índice de fluidez e da vazão de alimentação de hidrogênio para os modelos rigoroso e simplificado

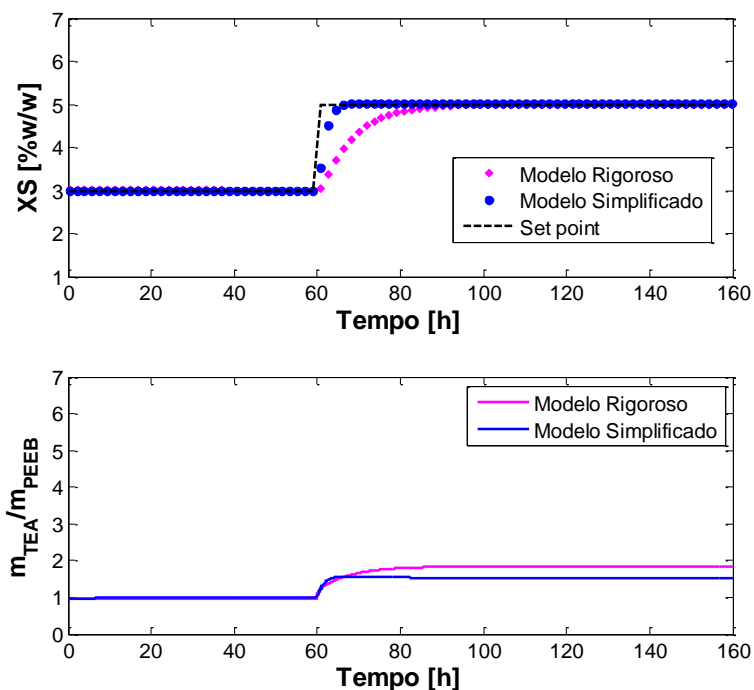


Figura 19 - Comparação do teor de solúveis em xileno e da razão de alimentação de TEA e PEEB para os modelos rigoroso e simplificado.

Pode-se observar que o comportamento dinâmico fornecido pelo modelo simplificado, embora apresente um pequeno desvio em relação ao modelo rigoroso, segue a mesma tendência, o que demonstra seu potencial para ser utilizado no algoritmo do filtro. Ressalta-se, ainda, que, para o caso do teor em solúveis em xileno, o modelo rigoroso é ligeiramente mais lento do que o simplificado, mas ambos têm a mesma resposta estacionária. Além disso, os desvios vistos nas variáveis manipuladas não foram considerados significantes, uma vez que as incertezas de medição devem ainda ser levadas em conta. Em malha fechada, o efeito das incertezas é propagado para as variáveis manipuladas para regular as variáveis controladas.

7.2. Efeito das incertezas de medição

Para considerar um cenário mais realista, ruído gaussiano foi adicionado às saídas do modelo rigoroso para obtenção das medidas simuladas. As Figuras 20-22 mostram o efeito dessas incertezas de medição no controle do processo diante dos

testes servo e regulador. Foram avaliadas as malhas da temperatura e do volume do reator, e do índice de fluidez. Nestas representações, os pontos vermelhos correspondem aos valores medidos e os diamantes azuis, aos valores exatos. As linhas tracejadas e contínuas representam, respectivamente, a ação das variáveis manipuladas quando as estruturas de controle recebem informações com incerteza (tracejadas) e informações precisas (contínuas).

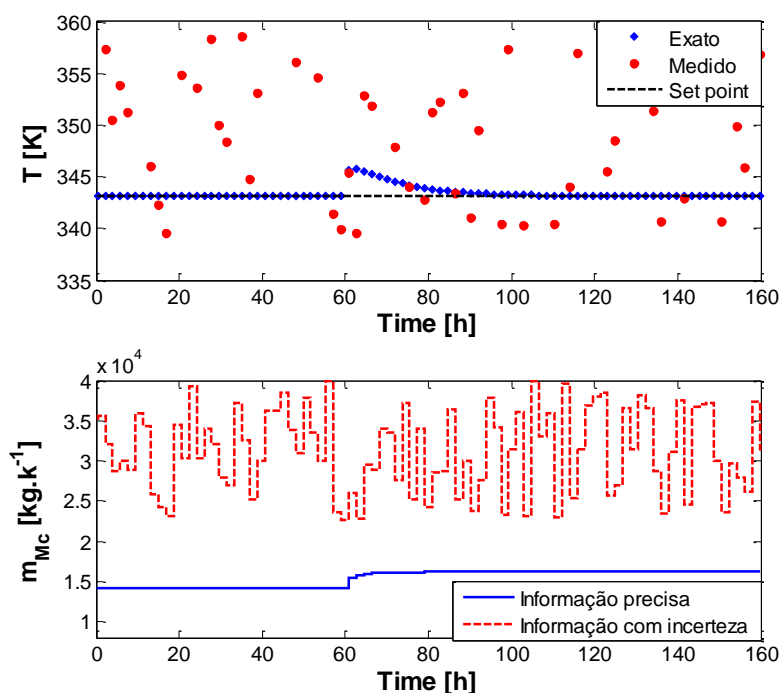


Figura 20 - Comportamento dinâmico diante de um teste do regulador para a temperatura do reator e vazão de monômero do condensado.

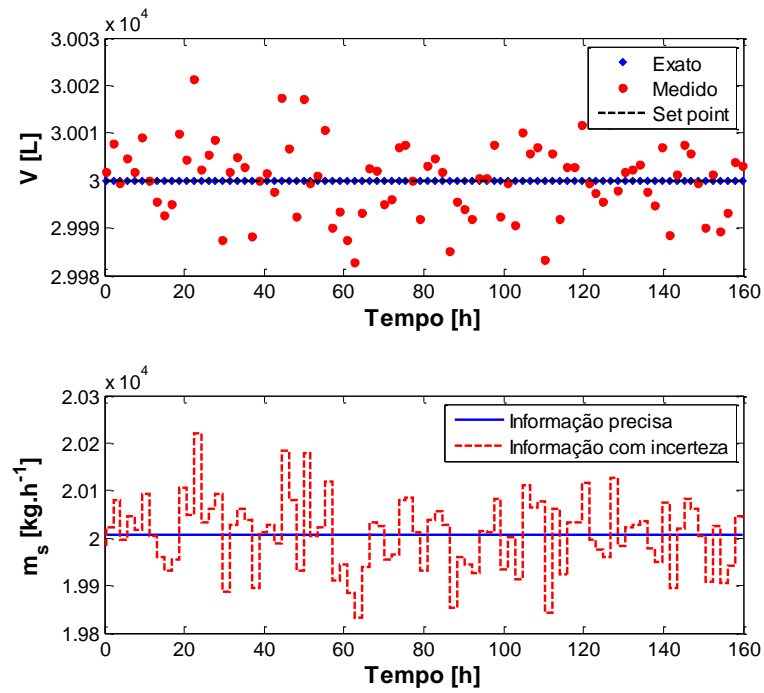


Figura 21 - Comportamento dinâmico diante de um teste do regulador para o volume do reator e vazão de saída de lama.

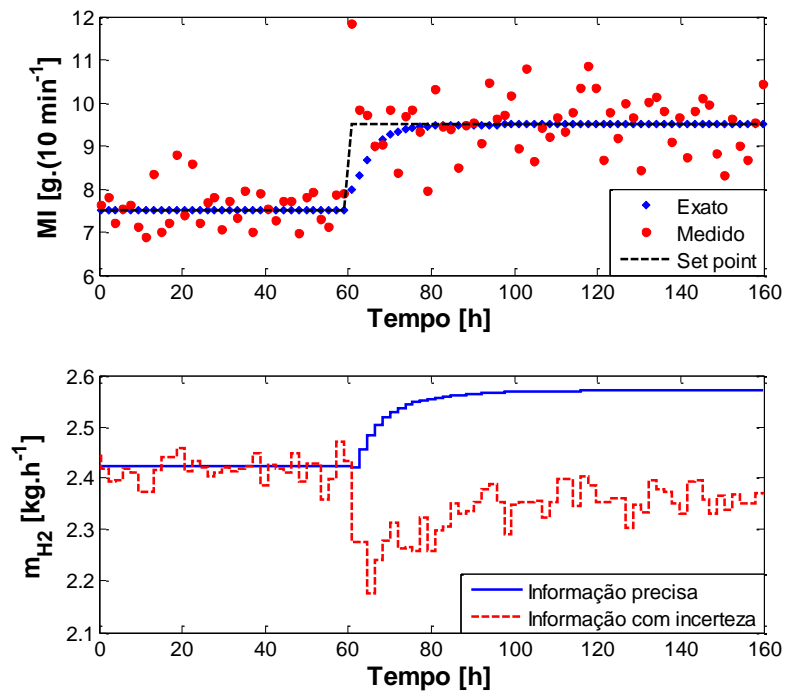


Figura 22 - Comportamento dinâmico diante de um teste do regulador para o índice- de fluidez e vazão de alimentação de hidrogênio.

Pode-se observar que, na presença de medição com ruído, a ação de controle perde a eficácia, não sendo capaz de manter firmemente a variável controlada no valor desejado. Também é observado que o ruído provoca grandes alterações no comportamento das variáveis manipuladas que se afastam de suas condições estacionárias e ficam mais oscilatórias. Por exemplo, no caso do controle da temperatura do reator, observa-se que, quando consideradas informações com incertezas, uma quantidade significativamente maior de monômero é arrefecida no condensador. Isso ocorre porque os controladores *feedback* acabam reciclando as flutuações de medição quando atuam nas variáveis de entrada. Isso é muito prejudicial para os equipamentos do processo, como as válvulas de controle, e pode deixar o processo em risco de falha, além de impactar na qualidade do produto final.

Em contrapartida, ao considerar valores exatos, pode-se observar que o controle consegue manter a variável controlada no valor desejado com robustez, mesmo na presença de perturbação e mudança no *set point*. Estes resultados reforçam a necessidade de qualquer passo adicional que minimize as incertezas de medição antes da informação ser fornecida ao controlador.

7.3. Esquema de controle com o sensor virtual associado

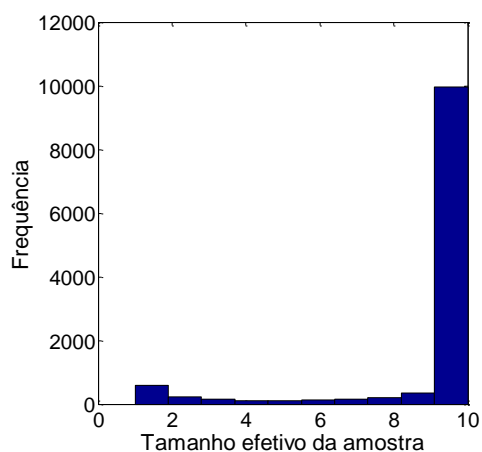
Neste ponto, as variáveis que não são medidas em linha foram então estimadas por meio do filtro SIR e da RNA, que estão comprometidos com a redução de ruído e obtenção de estados latentes, incluindo MI e XS.

Inicialmente, avaliaram-se diferentes configurações para o filtro, sendo considerados números de partículas (N_p) e níveis de incerteza para a evolução dos estados (σ_{part}) variados. A Tabela 4 mostra o tamanho efetivo da amostra (N_{eff}) para cada caso avaliado.

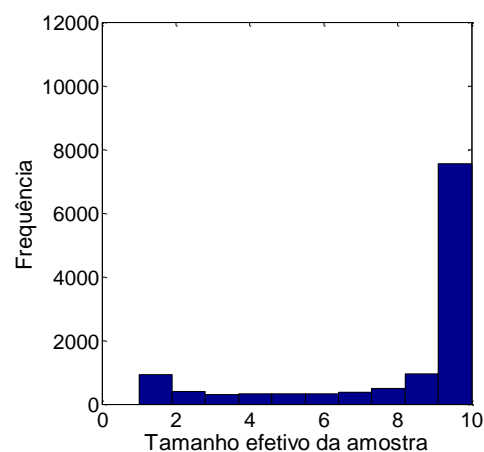
Tabela 4 - Tamanho efetivo da amostra de acordo com os números de partículas e níveis de incerteza do filtro SIR.

Número de partículas	σ_{part}	N_{eff} [%]
10	1%	90,26
	5%	80,84
	10%	74,46
50	1%	89,16
	5%	79,38
	10%	73,12
100	1%	88,99
	5%	79,22
	10%	73,04
200	1%	88,91
	5%	79,14
	10%	72,98

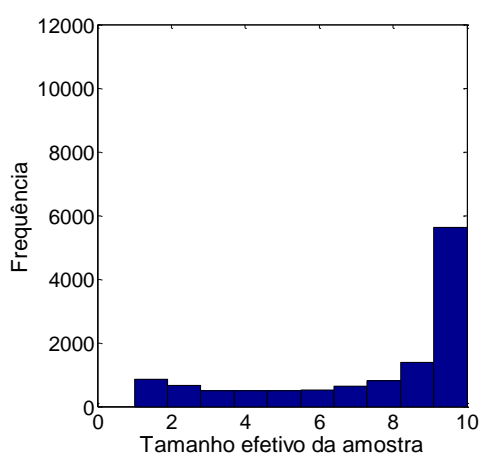
De acordo com os resultados exibidos na Tabela 4, o parâmetro N_{eff} , aparentemente, não indicou a ocorrência de degeneração severa de partículas. Para garantir que de fato este fenômeno não tenha ocorrido, avaliou-se também o histograma de frequência do tamanho efetivo da amostra, como evidenciado nas Figuras 23 e 24, para cada caso considerado. As simulações foram executadas considerando tempo total de 200 horas, com intervalos de amostragens de 1 minuto, realizando-se então 12000 amostragens. Nas Figuras 23 e 24, o eixo x indica o N_{eff} e o eixo y a frequência dos valores de tamanho efetivo da amostra ao longo da simulação.



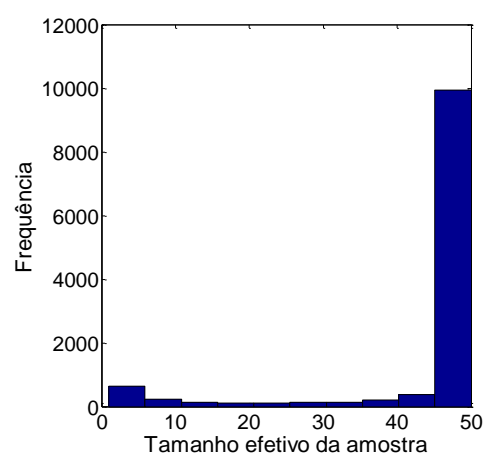
(A) – 1% de incerteza – 10 partículas



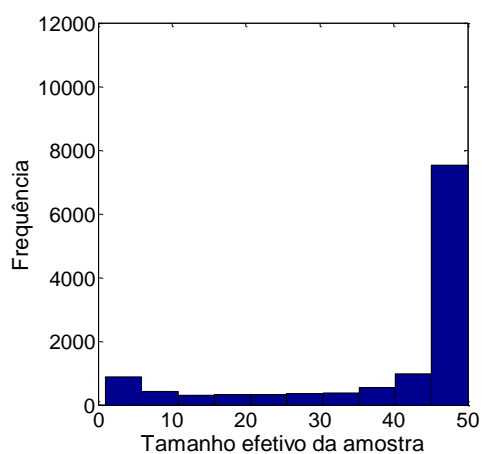
(B) – 5% de incerteza – 10 partículas



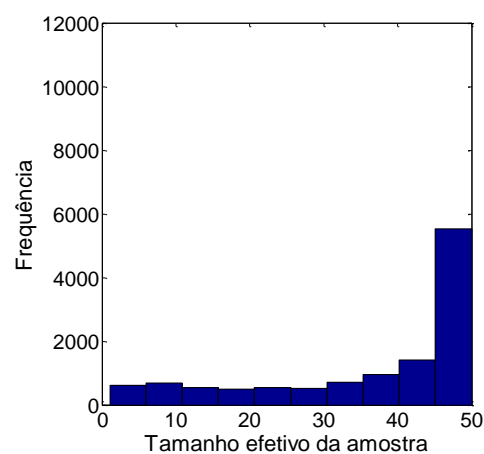
(C) – 10% de incerteza – 10 partículas



(D) – 1% de incerteza – 50 partículas

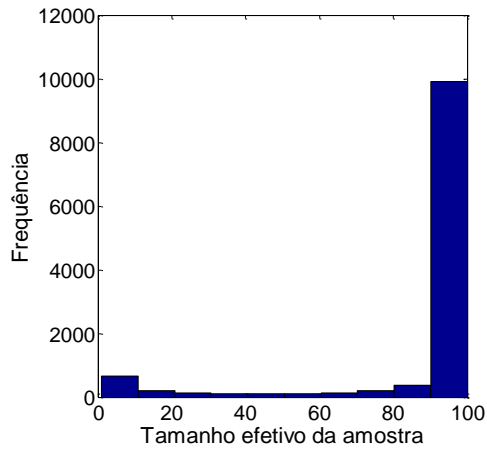


(E) – 5% de incerteza – 50 partículas

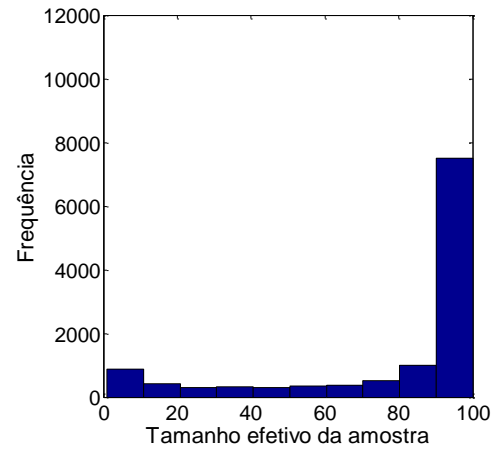


(F) – 10% de incerteza – 50 partículas

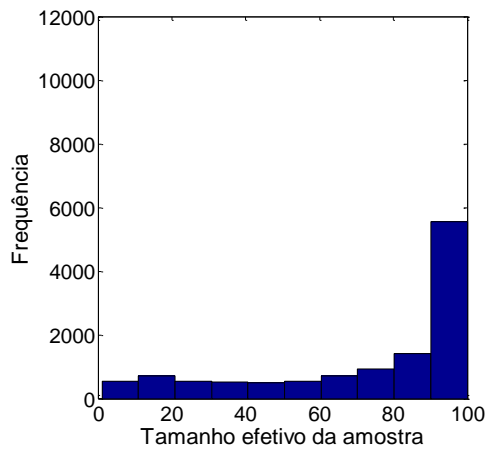
Figura 23 - Histogramas de frequência para o tamanho efetivo de amostra considerando 10 e 50 partículas.



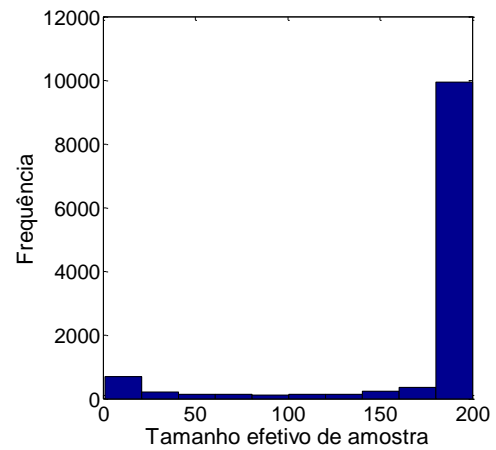
(A) – 1% de incerteza – 100 partículas



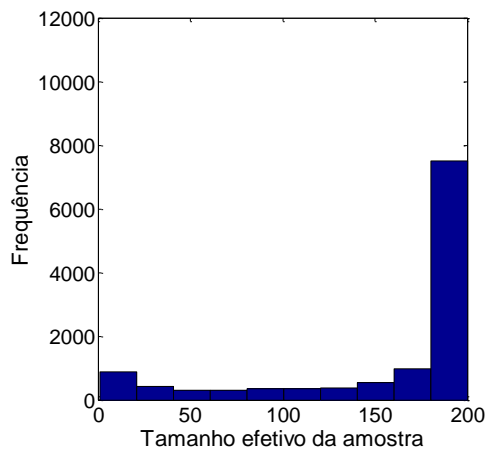
(B) – 5% de incerteza – 100 partículas



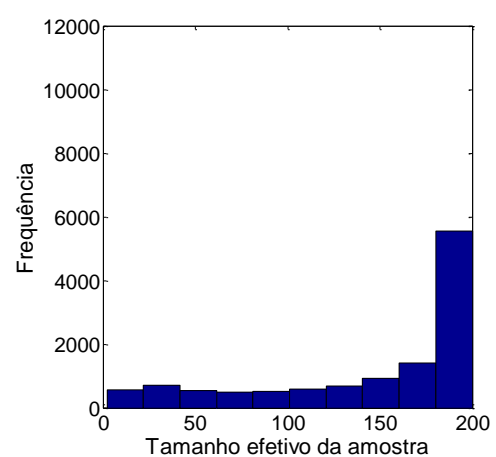
(C) – 10% de incerteza – 100 partículas



(D) – 1% de incerteza – 200 partículas



(E) – 5% de incerteza – 200 partículas



(F) – 10% de incerteza – 200 partículas

Figura 24 - Histogramas de frequência para o tamanho efetivo de amostra considerando 100 e 200 partículas.

Observa-se que, como o indicado pelas porcentagens médias de N_{eff} , de fato não ocorreu uma degeneração severa, uma vez que os histogramas apresentaram uma grande assimetria: a frequência de valores baixos é muito inferior à frequência de valores altos (próximos do número de partículas total). Desse modo, a largura máxima do intervalo de credibilidade pode ser utilizada como parâmetro de desempenho para selecionar o melhor o filtro.

A Tabela 5 mostra os resultados obtidos para as diferentes configurações de filtro testadas em termos da largura máxima do intervalo de credibilidade para cada variável estimada e do tempo médio de computo do filtro.

Tabela 5 - Largura máxima do intervalo de credibilidade.

Número de partículas	Nível de incerteza	V(L)	T(K)	$T_W(K)$	$\dot{m}_{comb}(kg/h)$	Tempo médio de ação do filtro [s]
10	1%	16,2883	1,8826	1,5128	52,3151	0,10
	5%	94,0499	9,2605	7,4136	256,5094	0,11
	10%	180,0240	18,9471	15,6954	504,4836	0,12
50	1%	14,7388	1,7835	1,4197	50,1588	0,35
	5%	89,4847	9,0973	7,0757	253,8475	0,43
	10%	169,2089	17,0236	13,6349	475,8912	0,48
100	1%	14,5765	1,6602	1,3122	47,2783	0,64
	5%	85,3188	8,4673	6,4439	238,6201	0,78
	10%	166,6306	16,7718	12,5076	475,1746	0,85
200	1%	12,9021	1,2287	0,9976	34,3042	1,28
	5%	84,7381	8,3903	6,3108	232,8673	1,52
	10%	163,9993	16,5767	11,9821	474,5253	1,69

Para cada número de partículas avaliado, nota-se que reduzir o nível de incerteza para a evolução do estado promoveu uma melhora na estimação do filtro. Esse parâmetro determina o campo de busca dentro do qual são geradas as partículas para a evolução dos estados. Quando a informação inicial do filtro é considerada

boa, um nível de incerteza pequeno leva a um melhor desempenho. Entretanto, se o conhecimento disponível não for suficiente, o recomendado é utilizar um nível de incerteza maior para que o campo de busca para a geração das partículas seja suficiente para explicar bem a dinâmica do processo.

Com o aumento do número de partículas observa-se uma diminuição da largura máxima do intervalo de credibilidade para todas as variáveis consideradas, demonstrando melhora no desempenho do filtro.

Já o tempo médio de computação é o tempo médio necessário para a estimativa (tempo de ação do filtro). Observou-se que esse tempo aumenta quando se considera maior número de partículas e maiores níveis de incerteza. No entanto, em todos os casos testados, ele foi muito menor do que o tempo de amostragem do processo, não sendo então um fator limitante para o uso da ferramenta em tempo real.

Assim, para integrar o esquema de estimação/controle, em conjunto com a rede neural e as estruturas de controle, foi selecionado o filtro com 200 partículas e nível de incerteza de 1%, que mostrou a espessura mais estreita do intervalo de credibilidade. Mesmo considerando um número de partículas elevado, o tempo de ação do filtro é consistente com os intervalos de amostragem usuais de instrumentos em um sistema de produção real.

Para testar o desempenho do controle *feedback* proposto, com o filtro de partículas SIR e a rede neural associados, foi aplicado um degrau regularizado de magnitude 2 no *set point* do índice de fluidez e do teor de solúveis em xileno (testes servo), no instante de tempo $t = 60 h$. Além disso, aplicou-se também um outro degrau de magnitude 10 K na temperatura da corrente de alimentação de monômero (teste regulador).

A Figura 25 mostra o comportamento dinâmico obtido para (A) a temperatura do reator com a manipulação da vazão de monômero arrefecido no condensador; e (B) volume do reator com manipulação da vazão de saída de lama. A Figura 26 mostra o comportamento dinâmico das variáveis latentes: (A) índice de fluidez com manipulação da vazão de alimentação de hidrogênio; e (B) teor de solúveis em xileno com manipulação da razão entre as vazões de alimentação de TEA e PEEB. Os diamantes vermelhos representam os valores medidos (com incerteza) e os pontos azuis os valores estimados. As linhas sólidas mais espessas indicam o ponto de ajuste (*set-point*) e a região hachurada, o intervalo de credibilidade.

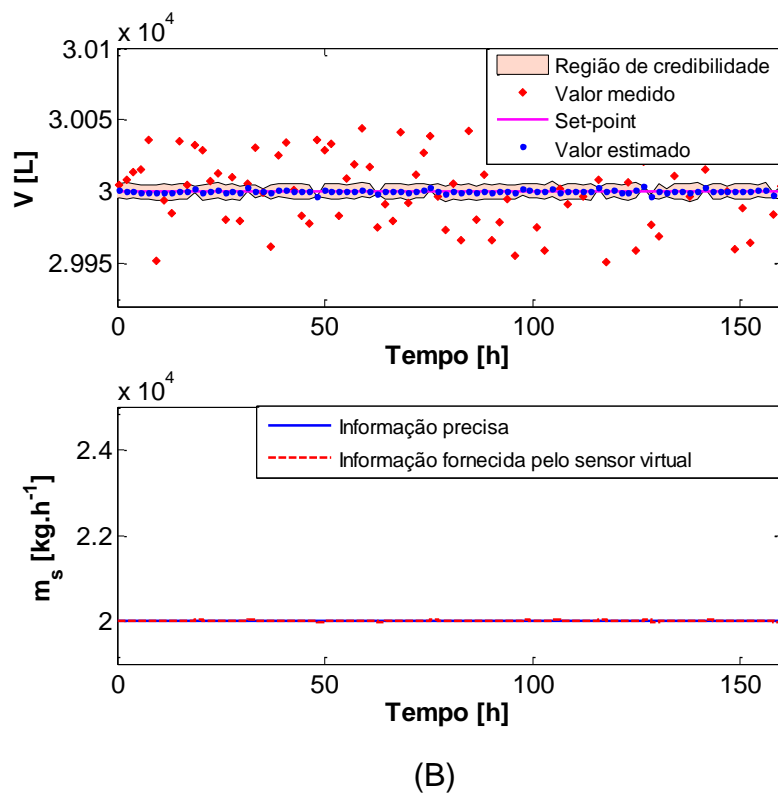
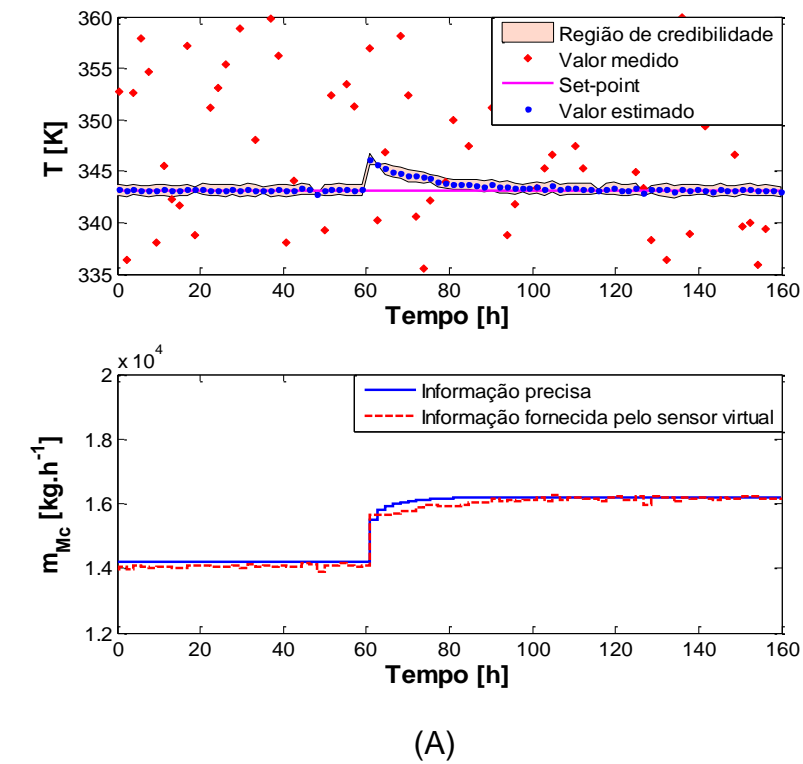
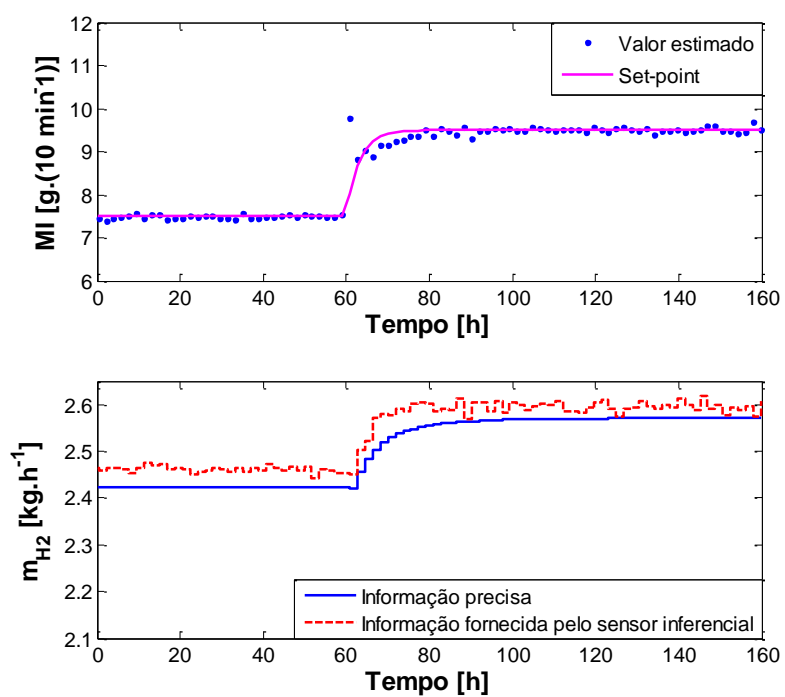
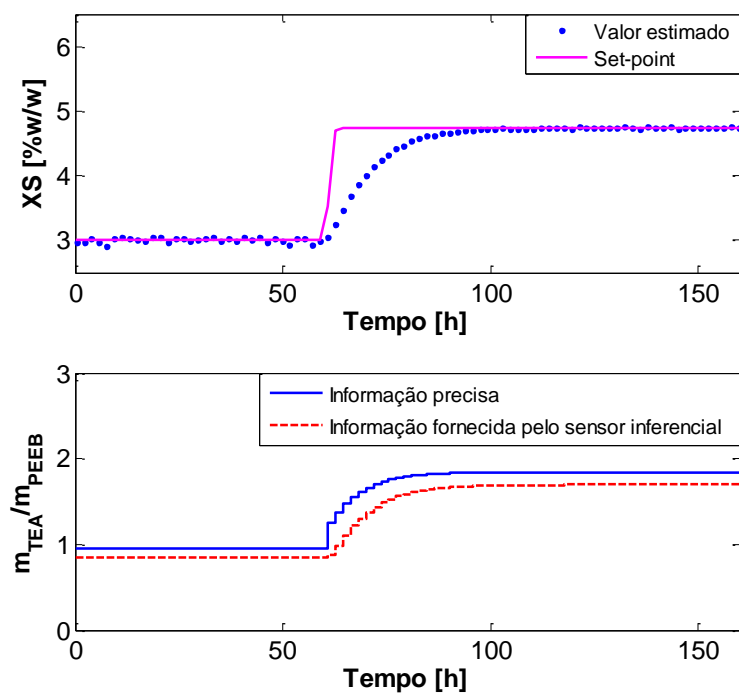


Figura 25 - Resposta dinâmica para os testes de desempenho: (A) Temperatura do reator e taxa de condensação; (B) Volume do reator e vazão de saída de lama.



(A)



(B)

Figura 266 - Valor estimado e respectiva manipulação para o loop de controle do (A) índice de fluidez; e (B) teor de solúveis em xileno.

O nível de 1% de incerteza fornece um intervalo de credibilidade bem estreito, então, como a maior parte das medi

das com incerteza estão fora dessa região e todos os valores estimados estão no interior, fica claro que o filtro foi capaz de reduzir os efeitos de incertezas de medição.

O esquema de controle proposto se mostrou eficaz, reduzindo o *offset* com ação de controle rápida. Os comportamentos observados nas Figuras 25 e 26 diferem dos observados nas Figuras 20 e 22, devido à qualidade da ação de controle. No primeiro resultado, o controlador foi baseado em medições puramente ruidosas que podem não corresponder ao valor real dos estados do processo. Portanto, a ação de controle tomada nessa condição não é eficaz. No segundo caso, as ações foram definidas de acordo com medidas com ruído reduzido, que estão mais próximas da realidade do processo. Isto promoveu uma melhoria na ação de controle, demonstrando que o sistema de controle associado com o filtro de partículas é uma ferramenta promissora para situações que requerem controle fino.

Esse desempenho de maior qualidade também pode ser observado no comportamento das variáveis manipuladas mostradas nas Figuras 25 e 26. Percebe-se que, com informações melhoradas (incerteza reduzida), essas variáveis oscilaram menos e se aproximaram do comportamento estacionário dos casos exatos (informação precisa), ajudando a preservar a integridade dos equipamentos. Vale ressaltar também que o índice de fluidez e o teor de solúveis em xileno são geralmente variáveis de medição *off-line* e isso dificulta a ação de controle dessas malhas. No entanto, com o esquema proposto foi possível a estimação *on-line* dessas duas variáveis, como mostrado na Figura 26, com base em outras variáveis de medição disponíveis e naquelas estimadas com o filtro.

8 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Este capítulo apresenta algumas conclusões gerais e comentários sobre o esquema de sensoriamento virtual associados às estratégias de controle para estimação de variáveis latentes e redução de incertezas, as contribuições deste estudo e algumas sugestões para trabalhos futuros.

Estratégias de controle para processos de polimerização enfrentam grandes desafios: a complexidade dos processos, a alta dimensão e integração das unidades e o alto grau de não linearidades. A existência de parâmetros desconhecidos, tais como constantes cinéticas e coeficientes de transferência de calor, e a presença de incertezas de medida também são fatores agravantes. Os sensores inferenciais são alternativas para lidar com essas questões. A ferramenta proposta neste trabalho, baseada em filtro de partículas e rede neural, permite lidar com processos extremamente não-lineares e complexos, muito comuns na engenharia química. Os resultados obtidos indicaram uma melhora significativa na ação de controle. O tempo de computação rápido e consistente com o intervalo de amostragem de um processo real, e a facilidade de implementação em processos automatizados ressaltam a potencialidade da ferramenta para aplicações em sistemas produtivos reais.

As contribuições dessa dissertação incluem a abordagem inovadora de combinar um filtro de partículas com uma rede neural para auxiliar no controle de um reator de polimerização simulado, contrapondo grande parte dos trabalhos de simulação encontrados na literatura, que não levam em conta as incertezas de medição e a indisponibilidade de instrumentos de medida. A consideração de *model mismatch* evidencia a potencialidade da ferramenta, uma vez que em casos reais os modelos obtidos nunca explicarão 100% dos fenômenos envolvidos no processo. Por fim vale destacar também que, por ser a 7ª defesa de dissertação de mestrado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal do Espírito Santo, este trabalho contribui para a consolidação da linha de pesquisa de Modelagem Otimização e Análise de Processos.

Os resultados de simulação indicaram o bom desempenho da ferramenta proposta. Sugere-se aqui, como trabalhos futuros, a validação experimental com um caso mais simples, algo não encontrado na literatura. Além disso, o esquema de estimação-controle envolveu a utilização de um modelo simplificado do processo de

polimerização. A redução de modelos sempre acarreta em alguma perda de informação. Parâmetros como a polidispersão e os pesos moleculares médios mássicos e numéricos, que são considerados no modelo rigoroso, não foram calculados no modelo simplificado. Mas, assim como o índice de fluidez e o teor de solúveis e xileno, esses parâmetros também podem ser relacionados com variáveis de medição disponíveis. Desse modo, também seria possível conhecer os seus valores por meio de sensores inferenciais, como o proposto nesse trabalho. Assim, sugere-se também a inclusão desses parâmetros na modelagem do processo. A investigação de técnicas de *approximation error model* que acrescentem informações ao modelo simplificado, de modo a melhorar sua resposta em comparação com o modelo rigoroso também seria uma continuação interessante do presente estudo. Essa técnica permite caracterizar estatisticamente os erros de aproximação do modelo e incorporar essa informação no algoritmo do filtro de partículas, por exemplo. Consequentemente, poderá haver melhora também no sensor virtual proposto.

9 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

APRUZZESE, F.; BALKE, S. T.; DIOSADY, L. L. In-line colour and composition monitoring in the extrusion cooking process. **Food Research International**, v. 33, p. 621-628, 2000.

ARULAMPALAM, M. S.; MASKELL, S.; GORDON, N.; CLAPP, T. A tutorial on particle filters for online nonlinear/non-gaussian Bayesian tracking. **IEEE Transactions on Signal Processing**, v. 50, p. 174-188, 2002.

ATASOY, I.; YUCEER, M. BERBER, R. Molecular weight control in acrylonitrile polymerization with neural network based controllers. In: **16th European Symposium on Computer Aided Process Engineering**, Alemanha, 2006.

BALBINOT, A.; BRUSSAMARELLO, V. J. **Instrumentação e fundamentos de medidas**. Rio de Janeiro: LTC, 2012.

BAS, E.; VEDIDE, R. U.; EGRIOGLU, E. Robustic learning algorithmfor multiplicative neuron model artificial neural networks. **Expert Systems With Application**, v. 56, p. 80-88, 2016. doi: 10.1016/j.eswa.2016.02.051.

BRASKEN – Relatório anual (2015). Disponível em: <https://www.braskem.com.br/-relatorioanual2015?utm_source=Site&utm_medium=BannerCarrossel&utm_campaign=Informe2015-Brasil>. Acesso em: 24/08/2016.

CALIXTO, R. H. L. Estudo comparativo entre os algoritmos adaboost online e filtro de partículas em rastreamento visual de objetos. 2014. 98p. Dissertação (Mestrado em Ciências da Computação) – Programa de Pós-Graduação Acadêmica em Ciências da Computação, Universidade Estadual do Ceará, Fortaleza, 2014.

CANETE, J. F.; SAZ-OROZCO, P. D.; GARCIA-MORAL, I.; GONZALEZ-PEREZ, S. Indirect adaptive structure for multivariable neural identification and control of a pilot distillation plant. **Applied Soft Computing**, v.12, p. 2728-2739, 2012a.

CANETE, J. F.; SAZ-OROZCO, P. D.; GONZALEZ-PEREZ, S.; GARCIA-MORAL, I. Dual composition control and soft estimation for a pilot distillation column using a neurogenetic design. **Computers and Chemical Engineering**, v. 40, p. 157-170, 2012b.

CARVALHO, R. F.; DIAS, A. C. S. R.; SILVA, W. B.; DUTRA, J. C. S. Filtro de partículas como observador online em um esquema de controle cascata para um reator contínuo. **Anais do XIX Encontro Nacional de Modelagem Computacional**, João Pessoa, 2016.

CERRUTI, L. Historical and Philosophical Remarks on Ziegler-Natta Catalysts. A Discourse on Industrial Catalysis. **International Journal for Philosophy of Chemistry**, v. 5, n. 1, p. 3-41, 1999.

CHEN, Z. **Bayesian Filtering From Kalman Filters to Particle Filters, and Beyond**. McMaster University, Hamilton: 2003.

CHEN, T.; MORRIS, J.; MARTIN, E. Particle filters for state and parameter estimation in batch processes. **Journal of Process Control**, v. 15, p. 665-673, 2005.

CRACKNELL, M. J.; READING, A. M. Geological mapping using remote sensing data: A comparison of machine learning algorithms, their response to variations in the spatial distribution of training data and the use of explicit spatial information. **Computers & Geosciences**, v. 63, p. 22-33, 2014.

COLAÇO, M. J.; ORLANDE, H. R. B.; SILVA, W. B.; DULIKRAVICH, G. S. Application of a Bayesian Filter to Estimate Unknown Heat Fluxes in a Natural Convection Problem. In: **ASME International Design Engineering Technical**

Conference & Computers and Information in Engineering Conference, Washington, 2011.

CUNHA, F. R.; SOUZA JÚNIOR, M. B.; FOLLY, R. O. M. Melt index flow and xylene solubles content virtual sensor applied to industrial production of polypropylene. In.: **XVIII Congresso Brasileiro de Engenharia Química**, Foz do Iguaçu, 2010.

DIAS, A. C. S. R.; DEMUNER, L.; RANGEL, F. D; DUTRA, J. C. S; SILVA, W. B. da. Online state estimation through particle filter for feedback temperature control. **Anais do XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química**. Fortaleza, 2016a.

DIAS, A. C. S. R; DUTRA, J. C. S; SILVA, W. B. da. Simulation and control of a propylene polymerization reactor with material integration using software emso. **Anais do XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química**. Fortaleza, 2016b.

DUARTE, E. R. **Avaliação e desenvolvimento de algoritmos de controle aplicado a um processo extrativo de fermentação alcoólica contínua**. 2007. 163p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2007.

DUTRA, J. C. S.; FEITAL, T. S.; SKOGESTAD, S.; LIMA, E. L.; PINTO, J. C. Control of bulk propylene polymerizations operated with multiple catalysts through controller reconfiguration. **Macromolecular Reaction Engineering**, v. 8, p. 201-216, 2014.

ELIÇABE, G. E.; MEIRA, G. R. Estimation and control in polymerization reactors. A review. **Polymer Engineering and Science**, v. 28, n.3, p. 121-135, 1988.

ELLIS, M. F.; TAYLOR, T. W.; JENSEN, V. G.; JENSEN, K. F. Estimativim of the Molecular Weight distribution in batch polymerization. **AIChE Journal**, v. 34, n. 8, p. 1341-1353, 1988.

EVENSEN, G. Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using Monte Carlo methods to forecast error statistics. **Journal of Geophysical Research**, v. 99, n. 5, p. 143-162, 1994.

FISCH, A. G. **Modelagem da cinética de polimerização em lama de eteno**. 2004. 125p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2004.

FONSECA, G. E.; DUBÉ, M. A.; PENLIDIS, A. A critical overview on sensors for monitoring polymerization. **Macromolecular Reaction Engineering**, v. 3, p. 327-373, 2009.

FONTOURA, T. B.; PINTO, J. C.; MELO, P. A. Modelagem de um reator tubular bifásico do tipo loop para a polimerização do propeno. **Anais do XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química**. Fortaleza, 2016.

GOLZAR, K.; AMJAD-IRANAGH, S.; MODARRESS, H. Investigation of polymer+solvent mixtures by means of cubic equations of state and artificial neural network. **Fluid Phase Equilibria**, 2016. doi: 10.1016/j.fluid.2016.01.052.

GONZAGA, J. C. B.; MELEIRO, L. A. C.; KIANG, C.; MACIEL FILHO, R. ANN-based soft-sensor for real-time process monitoring and control of an industrial polymerization process. **Computers and Chemical Engineering**, v. 33, p. 43-49, 2009.

HALIM, D. N. A. A.; SATA, S. A. Review on advanced control technique in batch polymerization reactor of styrene. In: **1st National Colloquium on Process Control**. Malasia, 2013.

HANAI, T.; OHKI, T.; HONDA, H.; KOBAYASHI, T. Analysis of initial conditions for polymerization reaction using fuzzy neural network and genetic algorithm. **Computers & Chemical Engineering**, v. 27, p. 1011-1019, 2003.

HAN, I. S.; HAN, C.; CHUNG, C. B. Melt index modeling with support vector machines, Partial least squares, and artificial neural networks. **Journal of Applied Polymer Science**, v. 95, p. 967-974, 2005.

HAYKIN, S. **Redes Neurais: Princípio e Prática**. Porto Alegre: Bookman, 2001.

HERGETH, W.-D. On-line Monitoring of Polymerization and Cure. **Sensors Update**, v. 5, p. 191–242, 1999.

HORN, J. Trajectory tracking of a batch polymerization reactor based on input–output-linearization of a neural process model. **Computers & Chemical Engineering**, v.25, p. 1561-1567, 2001.

HOSEN, M. A.; HUSSAIN, M. A.; MJALLI, F. S. Control of polystyrene batch reactors using neural network based model predictive control (NNMPC): An experimental investigation. **Control Engineering Practice**, v. 19, p. 454-467, 2011.

HOSEN, M. A.; KHOSRAVI, A.; NAHAVANDI, S.; CREIGHTON, D. Prediction interval-based neural network modelling of polystyrene polymerization reactor –A new perspective of data-based modelling. **Chemical Engineering Research and Design**, Article in press, 2014.

IHS MARKIT - Chemical Economics Handbook: Polypropylene Resins (2015). Disponível em: <<https://www.ihs.com/products/polypropyleneresinschemical-economicshandbook.html>>. Acesso em: 24/08/2016.

JIANG, H.; XIAO, Y.; LI, J.; LIU, X. Prediction of the melt index based on the Relevance vector machine with modified particle swarm optimization. **Chemical Engineering & Technology**, v. 35, n. 5, p. 819-826, 2012.

JO, J. H.; BANKOFF, S. G. Digital monitoring and estimation of polymerization reactors. **AiChE Journal**, v. 22, n. 2, p. 361-369, 1976.

JULIER, S. J.; UHLMANN, J. K. **A new extension of the Kalman filter to nonlinear systems**. The University of Oxford, 1997.

JULIER, S. J.; UHLMANN, J. K.; DURRANT-WHYTE, H. F. A new approach for filtering nonlinear systems. In: **American Control Conference**. Washington, 1995.

JULIER, S. J.; UHLMANN, J. K. Unscented filtering and nonlinear estimation. **Proceedings of the IEEE**, v. 92, n. 3, p. 401-422, 2004.

KADLEC, P.; GABRYS, B.; STRANDT, S. Data-driven soft sensors in the process industry. **Computers and Chemical Engineering**, v. 33, p. 795-814, 2009. doi:10.1016/j.compchem-eng.2008.12.012.

KAPIO, J.; SOMERSALO, E. **Statistical and computational inverse problems**, Applied Mathematical Sciences 160, Springer-Verlag, 2004.

KHATIBISEPEHR, S.; HUANG, B.; KHARE, S. Design of inferential sensors in the process industry: A review of Bayesian methods. **Journal of Process Control**, v. 23, p. 1575-1596, 2013.

KIM, K. L.; CHOI, K. Y. On-line estimation and control of a continuous stirred tank polymerization reactor. **Journal of Process Control**, v. 1, p. 96-110, 1991.

KONG, A.; LIU J.S., e WONG W.H. Sequential imputations and Bayesian missing data

problems. **Journal of the American Statistical Association**, v.89, p. 278–288, 1994.

KOZUB, D. J.; MACGREGOR, J. F. State estimation for semi-batch polymerization reactors. **Chemical Engineering Science**, v. 47, n. 5, p. 1047-1062, 1992.

LATADO, A.; EMBIRAÇU M.; MATTOS NETO, A. G.; PINTO, J. C. Modeling of end-use properties of poly(propylene/ethylene) resins. **Polimer Testing**, v. 20, p. 419-439, 2001.

LIMA, A. F. **Produção de copolímeros contendo olefinas e diolefinas com catalisadores ziegler-natta**. 2010. 144p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2010.

LIN, B.; RECKE, B.; KNUDSEN, J. K. H.; JORGENSEN, S. B. A systematic approach for soft sensor development. **Computers and Chemical Engineering**, v. 31, p. 419-425, 2007.

LI, R.; CORRIPIO, A. B.; HENSON, M. A.; KURTZ, M. J. On-line state and parameter estimation of EPDM polymerization reactors using a hierarchical extended Kalman filter. **Journal of Process Control**, v. 14, n. 8, p. 837-852, 2004.

LIU, J. Developing a soft sensor with online variable reselection for unobserved multi-mode operations. **Journal of Process Control**, v. 42, p. 90-103, 2016.

LOTUFO, F. A.; GARCIA, C. Sensores virtuais ou soft sensors: Uma introdução. **Proceeding of the VII Brazilian Conference on Dynamic, Control and Application**. Presidente Prudente, SP, Brazil, May7-9, 2008.

LUCCA, E. A.; MACIEL FILHO, R.; MELO, P. A.; PINTO, J. C. Modeling and simulation of liquid phase propylene polymerizations in industrial loop reactors. **Macromolecular Symposia**, v. 271, p. 8-14, 2008.

LUCCA, E. A. **Modelagem e simulação de reatores industriais em fase líquida do tipo loop para polimerização de propileno**. 2007. 99p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2007.

MACHADO, F.; LIMA, E. L.; PINTO, J. C.; McKENNA, T. F. Synthesis of propylene/1-butene copolymer in liquid pool and gas-phase process: A comparative analysis. **European Polymer Journal**, v. 44, p. 1102-1113, 2008.

MACHADO, F.; LIMA, E. L.; PINTO, J. C. Uma revisão sobre os processos de polimerização em suspensão. **Polímeros**, v. 17, n. 2, p. 166-179, 2007.

MACHADO, F.; PINTO, J. C. Uma revisão sobre polimerização de olefinas usando catalisadores Ziegler-Natta heterogêneos. **Polímeros**, v. 21, n. 4, p. 321-334, 2011.

MANALO, A.; ARAVINTHAN, T.; KARUNASENA, W.; TICOALU, A. A review of alternative materials for replacing existing timber sleepers. **Composite Structures**, v. 92, p. 603-611, 2010.

MATTOS NETO, A. G.; PINTO, J. C. Steady-state modeling of slurry and bulk propylene polymerizations. **Chemical Engineering Science**, v. 56, p. 4043-4057, 2001.

MENG, W.; LI, J.; CHEN, H.; LI, H. Modeling and simulation of ethylene polymerization in industrial slurry reactor series. **Chinese Journal of Chemical Engineering**, v. 21, n. 8, p. 850-859, 2013.

MEERT, K.; RIJCKAERT, M. Intelligent modelling in the chemical process industry with neural networks: a case study. **Computers & Chemical Engineering**, v. 22, p. S587-S593, 1998.

MONTEMERLO, M.; THRUN, S.; KOLLER, D.; WEGBREIT, B. FastSLAM: A factored solution to the simultaneous localization and mapping problem. **Eighteenth National Conference on Artificial Intelligence**. Menlo Park, CA, USA: American Association for Artificial Intelligence, 2002.

MUNDOPLAST - El consumo mundial de polipropileno (2013). Disponível em: <<http://www.mundoplast.com/noticia/el-consumomundial-polipropileno-alcanzara-los-624-millones-toneladas-2020/71607>>. Acesso em 24/08/2016.

NGUYEN, D.; GADHAMSHETTY, V.; NITAYAVARDHANA, S.; KHANAL, S.K. (2015). Automatic process control in anaerobic digestion technology: A critical review. **Bioresource Technology**, v.193, p. 513-522, 2015.

NOSE FILHO, K.; LOTUFO, A. D. P.; LOPES, M. L. M. Utilização de redes neurais artificiais e redes neuro fuzzy para a previsão de cargas elétricas. **7th Brazilian Conference on Dynamics, Control and Applications**. Presidente Prudente, SP, Brasil, 2008.

ODIAN, G. **Principles of polymerization**. 4^a ed. New Jersey: John Wiley & Sons, 2004.

OGAWA, M.; OHSHIMA, M.; MORINAGA, K. WATANABE, F. Quality inferential control of an industrial high density polyethylene process. **Jounal of Process Control**, v. 9, p. 51-59, 1999.

OLIVEIRA, A. G.; CANDREVA, P. M.; MELO, P. A.; PINTO, J. C. steady-state behavior of slurry and bulk propylene polymerization. **Polymer Reaction Engineering**, v. 11, n. 2, p. 155-176, 2003.

ORLANDE, H.; COLAÇO, M.; DULIKRAVICH, G.; VIANNA, F.; DA SILVA, W. B.; FONSECA, H.; FUDYM, O. State estimation problems in heat transfer. **International Journal for Uncertainty Quantification**, v. 2, p. 239-258, 2012.

PIMENTEL, W. R. O. **Aplicação de redes neurais artificiais e de quimiometria na modelagem do processo de craqueamento catalítico fluido**. 2005. 158p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2005.

POLZER, J.; MARKWORTH, M.; JELALI, M.; REDUELES, J. L.; SANFILIPPO, F.; LUPINELLI, M.; ONOFRI, L.; BUSCH, J.; MICHELS, P.; DIEZ, A.; CUADRADO, A. **Intelligent soft-sensor technology and automatic model-based diagnosis for improved quality, control and maintenance of mill production lines (Softdetect)**. Luxembourg: Research Fund for Coal and Steel series. 2009.

PRAKASH, J.; PATWARDHAN, S. C.; SHAH, S. L. Constrained Nonlinear State Estimation Using Ensemble Kalman Filter. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 49, p. 2242-2253, 2010.

PRAKASH, N. **Commodity thermoplastics with bespoke properties using metallocene catalyst systems**. In A. Tiwari, & H. Kobayashi (Eds.), *Responsive Materials and Methods: State-of-the-Art Stimuli-Responsive Materials and Their Applications*. Hoboken: John Wiley & Sons, 2013.

PRASAD, V.; SCHLEY, M.; RUSSO, L. P.; BEQUETTE, B. W. Product property and production rate control of styrene polymerization. **Journal of Process Control**, v. 12, p. 353-372, 2002.

PRATA, D. M.; LIMA, E. L.; PINTO, J. C. In-line monitoring of bulk polypropylene reactors based on data reconciliation procedures. **Macromolecular Symposia**, v. 271, p. 26-37, 2008.

PRATA, D. M.; LIMA, E. L.; PINTO, J. C. Simultaneous data reconciliation and parameter estimation in bulk polypropylene polymerizations in real time. **Macromolecular Symposia**, v. 243, p. 91-103, 2006.

PRATA, D. M. **Reconciliação robusta de dados para monitoramento em tempo real**. 2009. 233p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2009.

PRATA, D. M.; SCHWAAB, M.; LIMA, E. L.; PINTO, J. C. Nonlinear dynamic data reconciliation and parameter estimation through particle swarm optimization: Application for an industrial polypropylene reactor. **Chemical Engineering Science**, v. 64, p. 3953-3967, 2009.

PROTTES, S. M. **Controlador neural preditivo multivariável aplicado a uma planta piloto de neutralização de pH**. 2009. 130p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Industrial) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia, Centro Universitário do Leste de Minas Gerais, Coronel Fabriciano, 2009.

REGINATO, A. S. **Modelagem e simulação dos reatores de polimerização em fase líquida do processo Spheripol**. 2001. 150p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2001.

REGINATO, A. S.; ZACCA, J. J.; SECCHI, A. R. Modeling and simulation of propylene polymerization in nonideal loop reactors. **AIChE Journal**, v. 49, n. 10, p. 2642-2654, 2003.

RINCON, F. D.; ESPOSITO, M. ARAUJO, P. H. H.; SAYER, C.; LE ROUX, G. A. C. Calorimetric estimation employing the unscented kalman filter for a batch emulsion polymerization reactor. **Macromolecular Reaction Engineering**, v. 7, p. 24-35, 2013.

ROSA, I. S. **Análise dinâmica e de estabilidade de reatores tubulares de polimerização de propeno do tipo loop**. 2013. 251p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2013.

ROSA, I. S.; MELO, P. A.; PINTO, J. C. Bifurcation analysis of the bulk propylene polymerization in the LIPP Process. **Macromolecular Symposia**, v. 319, p. 41-47, 2012.

SANTANA, L. E. A. S. **Otimização em comitês de classificadores: Uma abordagem baseada em filtro para seleção de subconjuntos de atributos**. 2012. 168. Tese (Doutorado em Ciência da Computação) – Programa de Pós-Graduação em Sistemas e Computação, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 2012.

SANTOS, A. F.; SILVA, F. M.; LENZI, M. K.; PINTO, J. C. Monitoring and control of polymerization reactors using NIR spectroscopy. **Polymer-Plastics Technology and Engineering**, v. 44, n. 1, p. 1-61, 2005.

SANTOS JR, J. G. F.; PEIXOTO, L. S.; NELE, M.; MELO, P. A.; PINTO, J. C. Theoretical and experimental investigation of the production of pmma-based bone cement. **Macromolecular Symposia**, v. 243, p. 1-12, 2006.

SARKAR, P.; GUPTA, S. K. Simulation of propylene polymerization: an efficient algorithm. **Polymer**, v. 33, n.7, p. 1477-1485, 1992.

SCHORK, F. J.; DESHPANDE, P. B.; LEFFEW, K. W. **Control of Polymrization Reactors**. New York: Marcel Dekker, 1993.

SCHULER, H.; SUZHEN, Z. Real-time estimation of the chain length distribution in a polymerization reactor. **Chemical Engineering Science**, v. 40, n. 10, p. 1891-1905, 1985.

SEBORG, D. E.; EDGAR, T. F.; MELLICHAMP, D. A. **Process dynamic and control**. 2ª ed. New Jersey: John Wiley & Sons, 2004.

SHAO, X.; HUANG, B.; LEE, J. M. Constrained Bayesian state estimation – A comparative study and a new particle filter based approach. **Journal of Process Control**, v. 20, p. 143-157, 2010.

SHENOY, A. V.; PRAKASH, J.; PRASAD, V.; SHAH, S. L.; MCAULEY, K. B. Practical issues in state estimation using particle filters: Case studies with polymer reactors. **Journal of Process Control**, v. 23, p. 120-131, 2013.

SHENOY, A. V.; PRAKASH, J.; MCAULEY, K. B.; PRASAD, V.; SHAH, S. L. Pratical issues in the application of the particle filter for estimation of chemical processes. In **XVIII International Federation of Automatic Control World Congress**, pp. 2773-2778, 2011. Milano: IFAC.

SILVA, G. C. **Estudo de um controlador preditivo não linear multivariável baseado em redes neuronais**. 2014. 105p. Dissertação (Mestrado em Ciências) – Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2014.

SILVA, W. B. da. **Aplicação de filtros de partículas para a assimilação de dados em problemas de fronteira móvel**. 2012. 162p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2012.

SILVA, W. B. da; DUTRA, J. C. S.; ABREU, L. A. S.; KNUPP, D. C.; SILVA NETO, A. J. Estimation of timewise varying boundary heat flux via bayesian filters and markov chain monte carlo method. Apresentado na **XVIII Convención Científica de Ingeniería y Arquitectura**, Havana, Cuba, November, 2016.

SPEEKENBRINK, M. A tutorial on particle filters. **Journal of Mathematical Psychology**, v. 73, p. 140-152, 2016.

SOARES, P. L. B. Aplicação de redes neurais em conjunto com wavelets na detecção e atenuação de ruídos em imagens digitais e sísmicas. 2013. 79p. Dissertação (Mestrado em Ciência da Computação) – Programa de Pós-graduação em Ciência da Computação, Universidade Federal Rural do Semi-Árido, Mossoró – RN, 2013.

SRINIWAS, G. R.; ARKUN, Y.; SCHORK, F. J. Estimation and control of an α -olefin polymerization reactor. **Journal of Process Control**, v. 3, n. 5, p. 303-313, 1995.

TOBITA, H; HAMIELEC, A. E. Polymerization Processes, 2. Modeling of processes and reactors. **Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry**, 2015. doi: 10.1002/14356007.a21_305.pub3.

WILSON, D. I.; AGARWAL, M.; RIPPIN, D. W. T. Experiences implementing the extended Kalman filter on an industrial batch reactor. **Computers & Chemical Engineering**, v. 22, n. 11, p. 1653-1672, 1998.

YANG, X.; HUANG, B.; PRASAD, V. Inequality constrained parameter estimation using filtering approaches. **Chemical Engineering Science**, v. 106, p. 211-221, 2014.

ZACCA, J. J.; RAY, W. H. Modeling of the liquid phase polymerization of olefins in loop reactors. **Chemical Engineering Science**, v. 48, n.22, p. 3743-3765, 1993.

ZHANG, J. Batch-to-batch optimal control of a batch polymerisation process based on stacked neural network models. **Chemical Engineering Science**, v.63, p. 1273-1281, 2008.

ZHANG, J.; JIN, Q.; XU, Y. Inferential estimation of polymer melt index using sequentially trained bootstrap aggregated neural networks. **Chemical Engineering & Technology**, v. 29, n. 4, p. 442-448, 2006.

ZHANG, J.; MORRIS, A. J.; MARTIN, E. B.; KIPARISSIDES, C. Prediction of polymer quality in batch polymerisation reactors using robust neural networks. **Chemical Engineering Journal**, v. 69, p. 135-143, 1998.

ZHANG, M.; LIU, X. A soft sensor based on adaptive fuzzy neural network and support vector regression for industrial melt index prediction. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**. 2013. Doi: 10.1016/j.chemolab.2013.04.018.

ZHANG, M.; LIU, X.; ZHANG, Z. A soft sensor for industrial melt index prediction based on evolutionary extreme learning machine. **Process Systems Engineering and Process Safety**, 2016. doi: 10.1016/j.cjche.2016.05.030.

ZHANG, Z.; WANG, T.; LIU, X. Melt index prediction by aggregated RBF neural networks trained with chaotic theory. **Neurocomputing**, v. 131, p. 368-376, 2014.

APÊNDICES

Apêndice A – Artigo apresentado no XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química, em Fortaleza (DIAS *et al.*, 2016^a)



XXI Congresso Brasileiro
de Engenharia Química

Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro



XVI Encontro Brasileiro sobre o
Ensino de Engenharia Química
Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro

ONLINE STATE ESTIMATION THROUGH PARTICLE FILTER FOR FEEDBACK TEMPERATURE CONTROL

A. C. S. R. DIAS, L. DEMUNER, F. D. RANGEL, J.C. S. DUTRA¹ e W. B. da SILVA²

Federal University of Espírito Santo, Chemistry Engineering Program (PPEQ), Brazil.

LAMCES – Laboratório de Métodos Computacionais, Controle e Estimação

E-mail: ¹juliosdutra@yahoo.com.br; ²wellingtonuff@yahoo.com.br

RESUMO – *The demand for more economic and efficient processes may lead the plant to operate at several conditions. In this context, the use of automatic control structures for successful and safety operation is paramount. The control system performance depends on the quality of the process data. However, the sensor devices and measurement procedures are important uncertainty sources. For effective control actions, one alternative considers reducing the measurement noise so as to keep the operation at desired conditions. In this regard, this work studies the online use of particle filters to improve controller input data. The proposed scheme should estimate the actual states from noisy measures before determining the control action. A feedback temperature control was taken as an example. The results show that the scheme is a potential tool for online application in real process systems, since the computation time taken by the filter is consistent with usual sample times.*

1. INTRODUCTION

The globalization process and an increasing of the competition among companies in the market created a research demand for tools that are able to make the industrial processes more efficient and profitable. The quality of measured data in industrial plants is extremely important for the process control decisions, because the uncertainties associated with these data could make the process to operate in unsuitable conditions (Lotufo and Lucena, 2011).

The control rooms of industrial plants have systems and equipment, with which operators control, monitor and intervene in the process according to the need. Operational safety and working strategy are directly linked to the information provided by the control panel and hence with the data obtained from measuring instruments. Each device used to take action throughout the process has an associated uncertainty. Such uncertainty may be defined as an estimate featuring the range of values within which is the true value of the measured quantity. Generally, this uncertainty is specified by the manufacturer (Dos Santos et al., 2008).

The lack of calibration; the instability of the readings; certain environmental conditions, such as vibrations, electromagnetic noise, humidity; among other factors, may lead to increase the uncertainty of the sensors. One way to minimize this uncertainty is to use computational methods that are able to reduce at maximum these noises, before data is used by the controller. One method

PROMOÇÃO



REALIZAÇÃO



ORGANIZAÇÃO





XXI Congresso Brasileiro
de Engenharia Química

Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro



XVI Encontro Brasileiro sobre o
Ensino de Engenharia Química
Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro

that has been shown to be effective is the particle filters, which are based on sequential Monte Carlo method and aims to recover the data without noise (Colaço et al., 2012; Seborg et al., 2004).

This work aims at the implementation of online state estimation through particle filter for feedback control. The main idea is to eliminate possible measurement noise before sending process data to controllers. In this regard, the present work considers a temperature feedback control loop for a simulated heating tank to test the procedure.

2. BACKGROUND

2.1. Process Control

Chemical processes are operations that cause physical and/or chemical changes in materials, transforming raw material into the final product. Often, in order to perform these operations, we have a need to use tanks, to mitigate fluctuations, homogenizing substances, or even storing reagents, products and mixtures. The processes vary with time, and disturbances may take place during each operation. Such disruptions are undesirable and may affect the quality of the final product, produce material waste and even equipment damage. So it is necessary to introduce into process structures to deal with them, correcting and preventing such effects (Skogestad, 2004; Wang et al., 2008).

A feedback control system includes the process to be controlled and a set of controllers, configured to obtain the desired response by monitoring the process. It makes a comparison between the actual value of the variable and the value of interest (set point); and the controller action is determined from this difference (offset). In this way, the process monitoring becomes an important step for controlling the operation. The technological breakthrough of measuring instruments enables online monitoring of variables and parameters of the production system, enabling the detection of faults and disturbances in the process. However, the data sent by these instruments can also enclose errors from uncertainties caused by measurement limitations or even failure in the process (Seborg et al., 2004; Nguyen et al., 2015).

Automatic control allows integrating different equipments and industrial processes, keeping output variables at optimal values, reducing variability and minimizing the effects of disturbances. Thus, it ensures a more efficient and safe operation. However, when measurements with uncertainties are sent to the controller, the process variables can drift away from their set points, since the control actions are linked to measures that may not match the actual operation. These errors should be refined so that the process can operate as close as possible to the desired condition, satisfying mass and energy balances. This step is known as data reconciliation and is widely used associated with process control strategies (Seborg et al., 2004; Prata et al., 2010).

Another alternative potentially feasible, but not yet explored extensively, is the use of particle filters for measurement noise reduction in process systems. This tool allows obtaining variables and parameters of complex direct measurement because it is a robust estimator. The estimates can be used in process monitoring, fault detection and control.

PROMOÇÃO



REALIZAÇÃO



ORGANIZAÇÃO





XXI Congresso Brasileiro
de Engenharia Química

Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro



XVI Encontro Brasileiro sobre o
Ensino de Engenharia Química
Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro

2.2. Particle Filters

An efficient estimation way of states and parameters is use particle filters based on sequential method of sampling importance. This technique allows representing the posteriori density function using a set of random samples with associated weights for the calculation of the estimated variables. The Gaussian distribution is used to determine the initial state and to calculate the best estimate for the current state, based on the sequence of measures (Colaço et al., 2012).

Due to the robustness of the technique and its flexibility to handle nonlinear models and non-Gaussian errors, several studies covering particle filters are found in literature, as sequential importance sampling (SIS) and sequential importance resampling (SIR).

Sequential Importance Sampling (SIS): This filter allows the use of a set of particles (random samples) to represent the posteriori density function, each with a specific weight. Such methodology starts of an initial distribution when a certain number of particles are sampled at random. The advance in time is done using an observed value, and this is compared with the element of the sample to calculate their probability of occurrence. A higher probability results in a larger weight of the particle. It is then made standardization of the weights to determine the regions of greatest importance in the distribution. One of the main problems arising from the use of this method is the possibility of degeneration of the particles. This difficulty arises from the gradual increase in the variance of the weight of the particles and demand greater computational time to update it, since, with exception of one particle, the others may present negligible weight (Hammersley and Hanscomb, 1964; Doucet, 2008; Kaipio and Somersalo, 2004).

Sequential Importance Resampling (SIR): The fundamental theory of this technique has an additional step in relation to the SIS filter to avoid the problem of particle degeneration. This stage allows you to discard the particles of smaller normalized weight and "multiply" the ones of most weight, creating particles near to the regions with the highest probability. However, that requires a high computational cost and can promote diversity loss of sample (sample impoverishment), because the particles of higher weight can be selected more than once (Arulampalam et al., 2002; Gordon et al., 1993).

3. METHODOLOGY

This work proposes a system to control the temperature of a tank with heating jacket by manipulating the jacket fluid flow. In order to accomplish that, it was obtained a mathematical model for the tank based on first principles. The PI controller was designed based on discrete speed algorithm (Equation 1) and tuned throughout the simulations. In this equation, u and e represent respectively the manipulated variable and the offset; t_k and t_{k-1} represent instants of time; k_c is the proportional gain and τ_i is the integral time constant of the controller; and T_s is the sampling time.

$$u(t_k) = u(t_{k-1}) + k_c(e(t_k) - e(t_{k-1})) + T_s \frac{e(t_k)}{\tau_i} \quad (1)$$

In a real system, all available measurements have a certain degree of uncertainty. So to assess the effect of these uncertainties on the process control, two cases were considered: (1) an

PROMOÇÃO



REALIZAÇÃO



ORGANIZAÇÃO





XXI Congresso Brasileiro
de Engenharia Química
Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro



XVI Encontro Brasileiro sobre o
Ensino de Engenharia Química
Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro

ideal system (noise-free measurements) and (2) a more realistic system, to which was added Gaussian noise with zero mean and standard deviation of 5% to simulated data. It was also considered an evaluation of the control performance in the presence of a SIR filter, with 300 particles, associated to the control system (Figure 1). In this case, the measured temperature $T_m(t_k)$ is to be filtered - that is, the noised should be reduced, yielding the estimated temperature $T_{est}(t_k)$ - before calculating the control action $\Delta u(t_k)$.

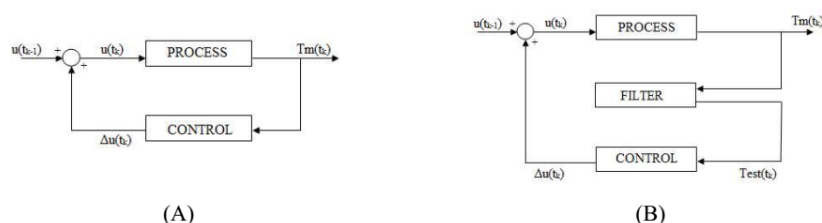


Figure 1 – Feedback control system representations: A) standard scheme; B) Particle filter based scheme.

It is worthy to highlight that different numbers of particles were not tested, since it would be beyond the scope of this work. However, it is very well known that the main effect of increasing the particle numbers is increasing of the computational burden. The algorithms were implemented by means of Matlab software on a computer with Intel® Core™ i7 processor.

It was considered a 99% confidence interval, computed for each sampling time by Equation (2) and (3), to assess whether the filter was able to reduce the effect of uncertainties.

$$L_{inf} = T_{est} - 2.576 \cdot \sigma_{est} \quad (2)$$

$$L_{sup} = T_{est} + 2.576 \cdot \sigma_{est} \quad (3)$$

In these equations, L_{inf} and L_{sup} are the lower and upper limits of confiança interval; and σ_{est} represent the uncertainty of the particles.

4. RESULTS

The controller was tuned for the standard feedback control scheme without considering noisy measurements, and the selected parameters were $k_c = 1.10^{-5} m^3 / (^\circ C.s)$ and $\tau_I = 0.8 s^{-1}$.

As a servo test, it was applied a 10 °C regularized step in the tank temperature set point to assess the performance of the proposed controller. Figure 2 shows the dynamical behavior considering noise-free measurements (Figure 2-A) and measurements with uncertainty (Figure 2 B).

PROMOÇÃO



REALIZAÇÃO



ORGANIZAÇÃO





XXI Congresso Brasileiro
de Engenharia Química
Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro



XVI Encontro Brasileiro sobre o
Ensino de Engenharia Química
Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro

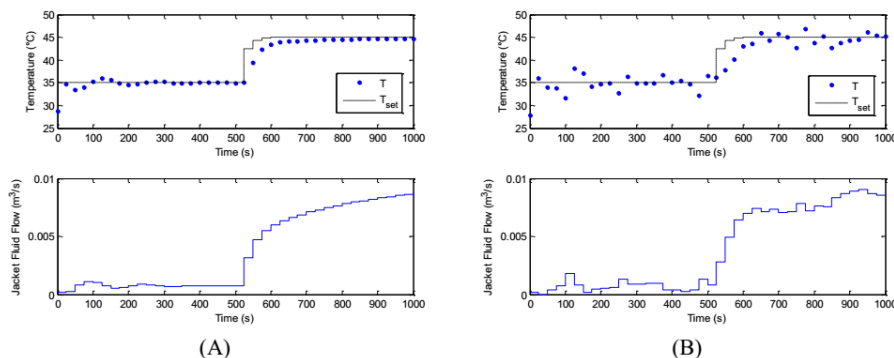


Figure 2 – Tank response for the servo test and the respective jacket fluid flow manipulation: (A) noise-free temperature measurement; (B) temperature measurement with added Gaussian noise.

Figure 2-A shows that the implemented control was able to reach and keep tightly the desired value for the tank temperature with rapid and smooth action. Figure 2-B shows that in the presence of measurements with noise (uncertainty), the control action is impaired and the controller cannot keep the temperature at the desired value, causing sustained oscillation. This sets up a problem when the process requires strict control. As all measuring devices have limited accuracy, it is impossible to obtain measurements without uncertainty. Thus, the behavior in Figure 2-A does not correspond to reality, so being an ideal case. But, using computational techniques associated with the control system, noise can be diminished for the process to operate as near as possible of desired conditions.

So as to test the performance of the proposed feedback control with the particle filter SIR, the same servo test was applied to the tank temperature. The results are shown in the Figure 3, where the red diamonds represent noisy measurements and the blue dots are measurements with reduced uncertainty (estimated temperature).

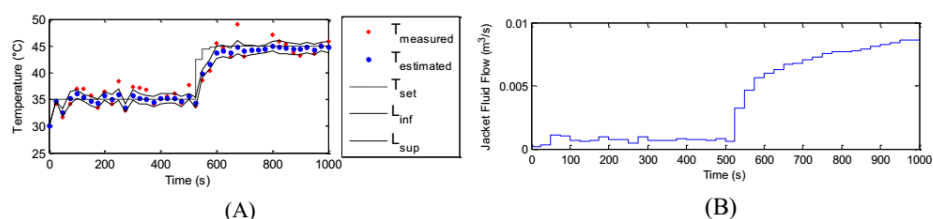


Figure 3 – Tank response for the servo test: (A) temperature dynamical behavior for the control system with associated the SIR filter; (B) respective control action on the jacket fluid flow.

The 1% level of uncertainty provides a thin confidence interval, thus, like most of the measurements with uncertainty are outside this range and all the estimated values are within that range, it is clear that the filter was able to reduce the effects measurement noises. It was observed

PROMOÇÃO



REALIZAÇÃO



ORGANIZAÇÃO





XXI Congresso Brasileiro
de Engenharia Química
Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro



XVI Encontro Brasileiro sobre o
Ensino de Engenharia Química
Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro

that the filter time action was an average value of 0.5 second, which is consistent with the sampling time. This implemented filter based control scheme was effective, reducing the offset with a fast action. The temperature behavior in Figure 3 differs from those in Figure 2 due to the quality of the control action. In the first result, the controller was based on noisy measurements, which may be far away from the actual value of the process states. So, control actions taken in this condition are very poor. In the filter based control, the actions are obtained according to measurements with reduced noise, which are closer to the reality of process. This promotes an improvement in the action control, demonstrating that the control system associated with the particle filter is a promising tool for situations that require strict control.

In order to perform a regulator test, it was applied a -5°C regularized step in the tank feed temperature from the time of 500 s. The results for the tank temperature behavior and the jacket fluid flow manipulation can be seen in Figure 4, considering the ideal case (Figure 4-A), noisy measurements (Figure 4-B) and filtered measurements with the particle filter SIR (Figure 4-C).

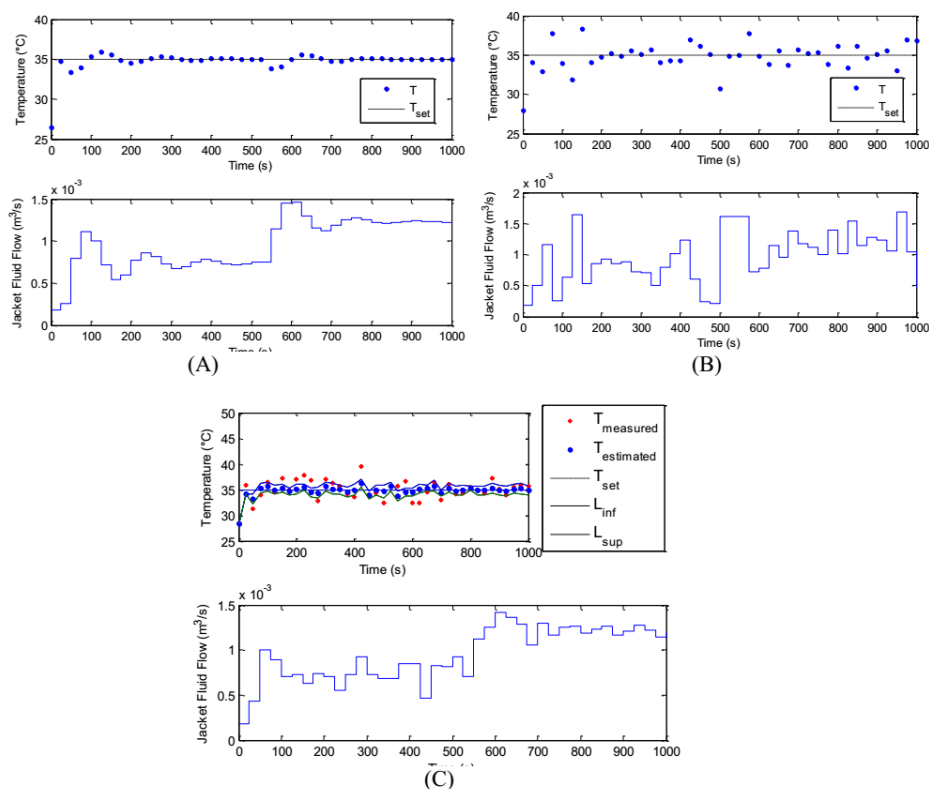


Figure 4 – Tank temperature for the regulator test and the respective jacket fluid flow manipulation according to the measurement nature: (A) noise-free; (B) Gaussian noise added; (C) noise-reduced.

Even in the presence of a disturbance, the controller was able to keep the temperature at the



XXI Congresso Brasileiro
de Engenharia Química
Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro



XVI Encontro Brasileiro sobre o
Ensino de Engenharia Química
Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro

set point for noise-free and noise-reduced cases. For measurements with Gaussian noise added, again the control action is impaired, making the particle filter a promising tool.

5. CONCLUSION

In this work, it was studied the use particle filters associated to the control system so as to improve control action. By means of the performed tests, it was noted that the measurements with uncertainties influence negatively the process control. However, online estimation through filtering the noisy measurements offers an alternative to correct the process data towards the actual states. In addition, as the particle filter algorithm make use of process model, the estimated variable may meet the balance of conservative quantities.

Excluding the noise-free case, which does not correspond to a real situation, the control system that exhibited the best performance was the particle filter based control scheme. For this approach, the deviation between the desired value and the actual value of the tank temperature was very small. It is noteworthy also that the rapid filter action (consistent with the sampling time) shows that this is a potential tool to be used online in industrial plants.

6. REFERENCES

- ARULAMPALAM, M. S.; MASKELL, S.; GORDON, N.; CLAPP, T. A tutorial on particle filters for online nonlinear/non-Gaussian Bayesian tracking. *IEEE Trans. Signal Processing*, vol. 50, p. 174–188, 2002.
- COLACO, M. J.; ORLANDE, H. H. B.; SILVA, W. B.; DULIKRAVICH, G. S. Application of Two Bayesian Filters to Estimate Unknown Heat Fluxes in a Natural Convection Problem. *J. Heat Transfer*, v. 134, p. 1528-8943-092511, 2012.
- DOS SANTOS, I. J. A. L.; TEIXEIRA, D. V.; FERRAZ, F. T.; DE CARVALHO, P. V. R. The use of a simulator to include human factors issues in the interface design of a nuclear power plant control room. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v.21, p. 227–238, 2008.
- DOUCET, A. *On sequential Monte Carlo methods for Bayesian filtering*. Editora: Cambridge University, 2008.
- GORDON, N.; SALMOND, D.; SMITH, A. F. M. Novel approach to nonlinear and non Gaussian Bayesian state estimation. *Proc. Inst. Elect. Eng., F*, vol. 140, p. 107–113, 1993.
- HAMMERSLEY, J. M.; HANSCOMB, D. C. *Monte Carlo Methods*. Londres: Editora Chapman & Hall, 1964.
- KAPIO, J.; SOMERSALO, E. *Statistical and Computational Inverse Problems*. Springer: Editora Verlag, 2004.
- LOTUFO, F. A.; LUCENA, S. E. The Reality of Virtual Sensor. In: The 9th Congress Latin American on Electricity Generation and Transmission, Mar del Plata, Argentina, 2011.
- NGUYEN, D.; GADHAMSHETTY, V.; NITAYAVARDHANA, S.; KHANAL, S. K. Automatic process control in anaerobic digestion technology: A critical review. *Bioresource Technology*, vol. 193, p. 513-522, 2015.
- PRATA, D. M.; LIMA, E. L.; PINTO, J. C. Simultaneous robust data reconciliation and gross

PROMOÇÃO



REALIZAÇÃO



ORGANIZAÇÃO





XXI Congresso Brasileiro
de Engenharia Química
Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro



XVI Encontro Brasileiro sobre o
Ensino de Engenharia Química
Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro

error detection through particle swarm optimization for an industrial polypropylene reactor. *Chemical Engineering Science*, v. 65, p. 4943-4954, 2010.

SEBORG, D. E.; EDGAR, T. F.; MELLICHAMP, D. A. Process dynamic and control. 2nd Ed. [SI]: John Wiley and Sons, 2004.

SKOGESTAD, S., Control structure design for complete chemical plants. *Computers and Chemical Engineering*, v. 28, pp. 219-234, 2004.

WANG, Y.; ZHOU, D.; QIN, S. J.; WANG, H. Active Fault-Tolerant Control for a Class of Nonlinear Systems with Sensor Faults. *International Journal of Control, Automation, and Systems*, v. 6, n. 3, p. 339-350, 2008.

PROMOÇÃO



REALIZAÇÃO



ORGANIZAÇÃO



Apêndice B – Artigo apresentado no XIX Encontro Nacional de Modelagem Computacional, em João Pessoa (CARVALHO et al., 2016)



FILTRO DE PARTÍCULAS COMO OBSERVADOR ONLINE EM UM ESQUEMA DE CONTROLE CASCATA PARA UM REATOR CONTÍNUO

Romero Florentino Carvalho¹. – romero.f.carvalho@gmail.com

Ana Carolina Spindola Rangel Dias¹. – ana_csrda@hotmail.com

Wellington Betencurte da Silva¹. – wellingtonuff@yahoo.com.br

Julio Cesar Sampaio Dutra¹. – juliosdutra@yahoo.com.br

¹ Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, UFES – Alegre, ES, Brasil

Resumo. A maior parte dos processos químicos reais apresenta comportamento não linear e incertezas que não seguem uma distribuição normal. Como consequência, o controle eficiente destes tipos de sistemas é uma etapa crucial para a geração e qualidade de produtos, segurança, viabilidade econômica e operacional da planta. Ocorre que nem sempre é possível obter as variáveis ligadas aos objetivos de controle por meio de medição em linha. Soma-se, ainda, a precisão finita dos equipamentos existentes que leva a incertezas nas medidas disponíveis. Diante deste cenário, surge a necessidade de ferramentas que visem estimar os parâmetros e estados latentes exigidos para o funcionamento das estratégias de controle e diminuir os efeitos de desvios nas variáveis controladas. Dessa maneira, este trabalho utiliza-se de um filtro de partículas, conhecido como SIR, associado ao controle cascata, com controladores PI, para um reator contínuo não isotérmico. Os resultados demonstram a eficiência do filtro SIR em estimar estados não medidos e amenizar os efeitos dos ruídos, promovendo uma melhora no desempenho da estratégia de controle, quando o mesmo é associado aos controladores.

Palavras-chave: Filtro de partículas, Estimação de estados, Controle de processos.

1. INTRODUÇÃO

O cenário econômico atual, marcado pela grande competitividade entre as empresas, pela busca contínua por menores custos e melhores resultados, incentiva o desenvolvimento de ferramentas que tornem os processos industriais mais eficientes e lucrativos. Neste panorama, as ferramentas de controle ganham destaque, garantindo, por exemplo, a segurança do processo, a qualidade do produto final, o melhor aproveitamento de material e adequação às leis ambientais restritivas. Para ocorrer uma ação de controle eficaz, é necessário uma observação adequada do processo (Dias *et al.*, 2016ab; Dutra, 2012).

O monitoramento de processos, mesmo com o avanço tecnológico atual, enfrenta alguns desafios, pois nem sempre existem dispositivos acessíveis para determinação de variáveis e

parâmetros importantes da operação. Quando há equipamentos disponíveis, podem surgir problemas devido a precisão limitada e instabilidades de leituras, provenientes de certas condições ambientais, como vibrações e ruídos eletromagnéticos (Balbinot & Brussamarello, 2012). Deste modo, as informações fornecidas pelos sensores instalados na planta apresentam incertezas significativas, que podem afetar as estruturas de controle e deixar o processo em risco de falha, comprometendo também a segurança da operação (Dias *et al.*, 2016b; Nguyen *et al.*, 2015; Hodouin, 2011).

Uma alternativa possível para minimizar os efeitos dos ruídos de medição é a utilização de análises bayesianas para redução de incertezas das medidas antes da informação ser enviada para os controladores. Tais ferramentas, a partir de valores conhecidos, permitem a estimação de variáveis latentes e de parâmetros, até então indisponíveis (Hoffmann *et al.*, 2016; Demuner *et al.*, 2015, da Silva, 2012).

Deste modo, este trabalho visa a implementação de uma estratégia de estimação de estado como um observador *on-line* por meio de um filtro de partículas associado a um esquema de controle cascata. Para tanto, é utilizado como estudo de caso simulado um reator contínuo de tanque agitado não isotérmico, conhecido como CSTR. A idéia principal é eliminar possíveis ruídos de medida e obter valores para variáveis latentes a partir das informações conhecidas antes de enviar os dados do processo aos controladores.

2. FUNDAMENTOS

2.1 Controle de Processos

Os sistemas de controle permitem alcançar valores ótimos para as variáveis de saída, reduzindo a variabilidade e minimizando o efeito de flutuações que surgem ao longo da produção, reforçando a segurança e a eficiência do processo. São estruturados a partir de combinações sistemáticas de variáveis medidas (y_m) e manipuladas (u), de modo a manter as variáveis controladas (y) em seus valores desejados (y_{set}) (Seborg, 2004).

Para o projeto de estruturas de controle, é necessário conhecimento sobre o comportamento do processo combinado com certo grau de criatividade. É preciso determinar quais variáveis devem ser controladas, quais variáveis devem ser medidas, quais entradas devem ser manipuladas e quais parâmetros devem ser definidos para se alcançar o desempenho desejado. A implementação prática depende também da disponibilidade de sensores e de atuadores, assim como de operadores treinados (Skogestad, 2004).

Muitas vezes é necessário decompor o problema de controle em diversas camadas hierárquicas, com base no tempo de atuação de cada controlador, para atingir os diversos objetivos do controle. O tempo de atuação em cada camada pode variar em larga faixa, podendo ser de uma fração de segundos a dias, como mostra a Fig. 1.

A camada inferior (controle regulatório) atenua os efeitos das perturbações sobre a estabilidade do processo. A camada superior (controle supervisório) assegura a qualidade do produto final, representando então um ajuste fino ao processo. As camadas hierárquicas superiores trabalham com aspectos operacionais do processo e informações do mercado para atingir objetivos globais de controle. Os *set points* (y_{set}) das variáveis controladas conectam duas camadas em uma hierarquia de controle, sendo que a camada superior calcula o valor de y_{set} a ser considerado na camada inferior (Larsson & Skogestad, 2000; Dias *et al.*, 2016b).

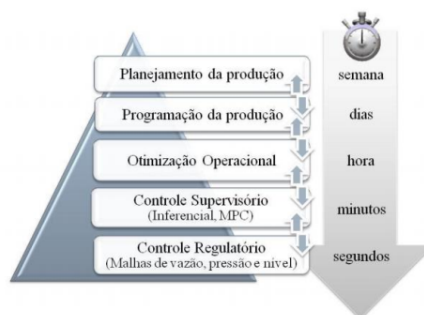


Figura 1 – Representação da decomposição hierárquica da estrutura de controle de uma planta industrial baseada em escala de tempo (adaptado de Skogestad, 2000).

Independente da quantidade de camadas e do arranjo selecionado, o monitoramento do processo é uma etapa de extrema importância. Entretanto, mesmo com o grande avanço tecnológico dos instrumentos de medida, a precisão finita e as limitações dos equipamentos levam a informações contendo desvios significativos (erros de medição) (Balbinot & Brussamarello, 2012; Bega *et al.*, 2011). Quando medidas com incertezas são alimentadas no controlador, as variáveis do processo podem se afastar de seus valores desejados, uma vez que a ação de controle está vinculada com valores que podem não corresponder à operação real, deixando o processo em risco. Estes erros, sejam eles randômicos ou de instrumentos, podem ser refinados, de modo a permitir que o processo opere o mais próximo possível das condições desejadas, respeitando balanços de massa e de energia. Esta etapa é conhecida por reconciliação de dados e é muito utilizada em conjunto com as estratégias de controle de processos (Dias *et al.*, 2016a; Prata, Lima & Pinto, 2010).

Outra alternativa, potencialmente viável, que vem ganhando destaque nos últimos anos, é a utilização de filtros de partículas para redução de ruídos de medidas. Esta ferramenta permite também a obtenção de variáveis latentes de difícil medição direta e de parâmetros (Dias *et al.*, 2016ab; Hoffmann *et al.*, 2016; Yang *et al.*, 2016).

2.2 Estimação com filtro de partículas

Os filtros de partículas são algoritmos baseados no método sequencial de Monte Carlo (SMC) que permitem a estimação de estados e de parâmetros a partir de um conjunto conhecido de amostras aleatórias (distribuição *a priori*) com pesos associados. A distribuição Gaussiana é utilizada para se obter a melhor estimativa para o estado atual com base na sequência de medidas. Sequencialmente, utiliza-se um valor observado para comparação com o elemento da amostra de partículas para o cálculo de sua probabilidade de ocorrência. Uma maior probabilidade resulta em um maior peso da partícula. É feito então a normalização dos pesos para determinação das regiões de maior importância da distribuição. Entretanto, com essa etapa pode ocorrer um aumento gradativo da variância dos pesos das partículas até que uma única partícula apresente peso não desprezível. Esse evento, conhecido por degeneração, promove um aumento significativo do esforço computacional ao atualizar amostras que pouco ajudam na aproximação da distribuição *a posteriori* (Doucet, 2008; Olivier; Huang & Craig, 2012).

Como forma de evitar a degeneração das partículas, uma alternativa é a utilização de uma etapa adicional de reamostragem no algoritmo do filtro. Neste passo, as partículas com menor peso são descartadas e as de maior peso replicadas, originando partículas mais próximas às regiões de maior probabilidade. Entretanto, ocorre uma perda de diversidade amostral (empobrecimento da amostra), pois as partículas de maior peso são selecionadas mais de uma vez. O filtro de reamostragem por importância sequencial (SIR) apresenta essa etapa adicional e é considerado neste trabalho (Arulampalam *et al.*, 2012; da Silva, 2012).

3. METODOLOGIA

Este trabalho utilizou um modelo típico de um CSTR, obtido a partir de balanços de massa e de energia, para a avaliação de um esquema de estimação de estados latentes simultaneamente com o controle do processo. Os parâmetros necessários para a simulação foram retirados do trabalho de Kittisupakorn e Hussain (2000).

O sistema de controle proposto é dividido em duas camadas hierárquicas, com diferentes escalas de tempo para ação do controlador. A camada inferior, composta pela malha de controle da temperatura do reator, é realizada em intervalos de tempo menores, pois garante a estabilidade do processo. A camada superior, composta pela malha da concentração, atenua os efeitos das perturbações na qualidade do produto final. Trata-se de um ajuste fino e é ativada em intervalos de tempo maiores. As variáveis manipuladas selecionadas para cada malha foram, respectivamente, a temperatura de fluido refrigerante e o *set point* da temperatura do reator. Os controladores do tipo PI (Proporcional-Integral) foram implementados para ambas as camadas de acordo com o algoritmo discreto de velocidade dado pela Eq. 1.

$$u(t_k) = u(t_{k-1}) + k_c \left[e(t_k - t_{k-1}) + T_s \frac{e(t_k)}{\tau_i} \right] \quad (1)$$

Nesta representação, $u(t_k)$ é a variável manipulada no instante de tempo k , k_c é o ganho do controlador, $e(t_k)$ é erro entre o valor do *set point* e o valor da variável controlada no instante k , T_s é o tempo de amostragem e τ_i é a constante de tempo integral do controlador.

Comparou-se a ação do controlador considerando a presença e a ausência de um filtro SIR associado ao sistema de controle, como mostra a Fig. 2.

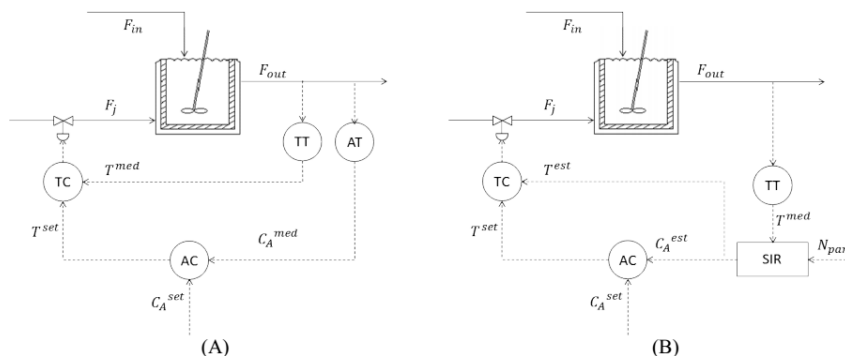


Figura 2 – Fluxograma simplificado do processo considerando: A) Esquema de controle convencional; e B) Esquema de controle com filtro de partículas associado.

Na Fig. 2, TT , AT , AC e TC representam, respectivamente, os sensores e os controladores de temperatura e de concentração. O filtro de partículas está retratado pelo bloco SIR. Ele recebe as informações da planta, no caso as medidas de temperatura (T^{med}) da corrente de saída (F_{out}) e fornece os valores de temperatura (T^{est}) e de concentração (C_A^{est}) estimados para os controladores. Estes definem suas ações com base nos *set points* de temperatura (T^{set}) e de concentração (C_A^{set}) fornecidos.

Os tempos de amostragem das camadas regulatória e supervisória considerados foram, respectivamente, 1 e 5 minutos, consistentes com o tempo necessário para se obter medidas de qualidade em um processo real. Assim, a camada superior é ativada a cada 5 vezes que a inferior é realizada.

Para obtenção das medidas de concentração e temperatura utilizou-se como níveis de incerteza 1% e 5% da condição inicial, respectivamente. Considerou-se um intervalo de confiança de 99%, calculado para cada tempo de amostragem pelas Eq. (2) e (2), para avaliar se o filtro foi capaz de reduzir os efeitos das incertezas. Foram testados diferentes números de partículas (a saber: 10, 100 e 500) e, para avaliar o desempenho e selecionar o filtro de melhor performance, foi utilizado o RMSE (*Root Mean Square Error*), que é o parâmetro mais utilizado na literatura, fornecido pela Eq. 4.

$$L_{inf} = T_{est} - 2.576 \cdot \sigma_{est} \quad (2)$$

$$L_{sup} = T_{est} + 2.576 \cdot \sigma_{est} \quad (3)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (y_t - \hat{y}_t)^2} \quad (4)$$

Nestas equações, L_{inf} e L_{sup} são, respectivamente, são os limites do intervalo de confiança e σ_{est} representa a incerteza das partículas. N é o número de medidas, y_t o valor exato da variável e \hat{y}_t o valor estimado.

Os algoritmos foram implementados por meio do *software* Matlab em um computador com processador Intel® Core™ i7.

4. RESULTADOS DA SIMULAÇÃO

O controlador foi sintonizado considerando o esquema de controle padrão e medidas sem ruídos. Os parâmetros selecionados estão contidos na Tabela 1.

Tabela 1 – Parâmetros dos controladores PI.

Malha de controle	k_c	τ_i (min)	T_s (min)
$T \leftrightarrow T_j$	7 ^(a)	4	1
$C_a \leftrightarrow T_{set}$	0,05 ^(b)	0,02	5

1. A unidade do ganho k_c para cada malha é: a) adimensional; b) $m^3 \cdot K \cdot kmol^{-1}$.

2. A sintaxe $y \leftrightarrow u$ significa que y é controlado pela manipulação de u .

Para avaliar o desempenho dos controladores propostos, foi realizado um teste servo, no qual um degrau de -10% foi aplicado no *set point* da concentração de reagente. A Fig. 3 mostra o comportamento dinâmico (A) da concentração de reagente com a manipulação no *set*

point da temperatura; e, (B) da temperatura do reator com a manipulação na temperatura da jaqueta, considerando, para ambos os casos, medidas exatas e com ruídos.

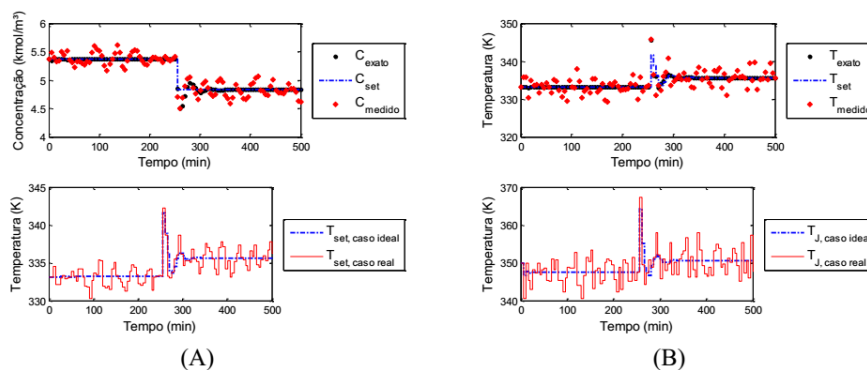


Figura 3 - Comportamento dinâmico para: A) Concentração de reagente com a manipulação no *set point* da temperatura; B) Temperatura do reator com manipulação na temperatura da jaqueta, considerando o esquema de controle convencional.

A Fig. 3 mostra o efeito das incertezas de medida sobre o controle do processo. Percebe-se que no caso de medidas sem ruído (caso exato), o controlador foi capaz de manter a variável controlada no *set point* com robustez, ou seja, de forma rápida e com os seus valores muito próximos do desejado. Contudo, na presença de incertezas, percebem-se desvios consideráveis entre o valor desejado e o valor real no decorrer da simulação. Esse efeito também pode ser notado nas variáveis manipuladas, as quais, na presença de ruídos (caso real), ficam oscilando durante todo tempo de simulação. Este comportamento não é o adequado, pois pode danificar equipamentos, como as válvulas, e deixar o processo em risco.

Quanto ao problema de estimação, avaliou-se o desempenho do filtro de partículas para diferentes números de partículas através do RMSE, cujo resultado é mostrado pela Tabela 2.

Tabela 2–Teste de desempenho do filtro SIR.

Número de partículas	RMSE	Tempo médio de cômputo (s)
10	0,7865	0,0247
100	0,7389	0,1785
500	0,7073	0,8708

Pode ser observado que ao aumentar o número de partículas há uma melhora no desempenho de estimação do filtro. O tempo médio de computo é a média do tempo necessário para a estimação (tempo de ação do filtro). Percebe-se seu aumento quando são considerados números de partículas mais elevados. Entretanto, em todos os casos testados, ele foi muito menor o tempo de amostragem do processo, não sendo então um fator limitante para a utilização da ferramenta. Desta forma, selecionou-se, para aplicação em conjunto com as estruturas de controle, o filtro SIR com 500 partículas.

Depois da seleção do número de partículas, aplicou-se um degrau de -10% no *set point* da concentração de reagente. A Fig. 4 exibe o comportamento dinâmico (A) da concentração de reagente com a manipulação no *set point* da temperatura e (B) a temperatura do reator com a manipulação na temperatura da jaqueta.

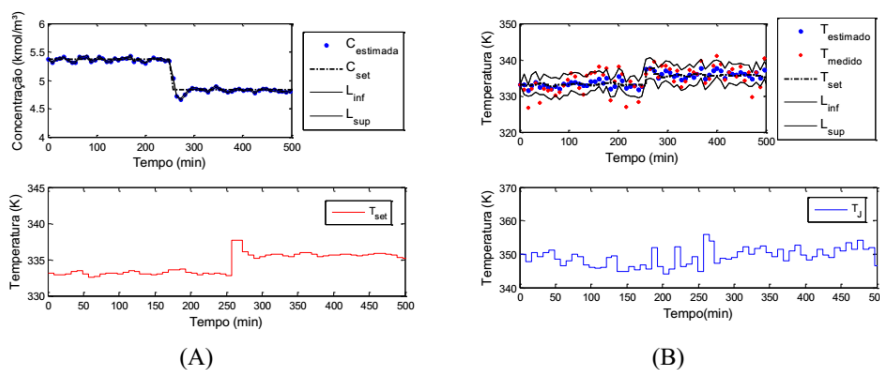


Figura 4 – Comportamento dinâmico considerando o esquema de controle com filtro:
A) Concentração de reagente com a manipulação no *set point* da temperatura;
B) Temperatura do reator com manipulação na temperatura da jaqueta.

Vale ressaltar que a concentração não foi considerada medida em linha e seu valor foi estimado pelo filtro com base em medições de temperatura. A Fig. 4 mostra que o esquema de controle com filtro exibe uma melhora em relação ao esquema tradicional mostrado na Fig 3, mantendo o valor das variáveis de interesse mais próximas do valor desejado. Esta melhora também é observada para as variáveis manipuladas que ficaram menos oscilatórias. Nota-se ainda, na Fig. 4-B, que parte das medidas com incerteza encontra-se fora do intervalo de confiança, ao passo que os valores estimados estão todos dentro deste intervalo, demonstrando a eficiência do filtro para a redução dos ruídos de medição.

5. CONCLUSÃO

Em um sistema de produção real, nem sempre existem instrumentos disponíveis e, mesmo quando existem, as informações fornecidas apresentam incerteza que influenciam no desempenho de controle. Isto pode deixar o processo em risco de falha, afetar sua segurança e trazer custos associados com produtos fora de especificação. Neste trabalho, como forma alternativa para a indisponibilidade e para a falta de precisão de equipamentos de medidas, estudou-se um esquema de controle com filtro de partículas associado para estimação de variáveis não medidas em linha e redução de incertezas. Essa proposta demonstrou-se satisfatória, exibindo melhora significativa no controle do processo. A ação do filtro foi rápida e consistente com os tempos de amostragem de um processo real, demonstrando a potencialidade da ferramenta para utilização em linha em um sistema real.

REFERENCES

- Arulampalam, M. S.; Maskell, S.; Gordon, N.; Clapp, T. (2002), A tutorial on particle filters for online nonlinear/non-Gaussian Bayesian tracking. *IEEE Trans. Signal Processing*, vol. 50, 174–188.
- Balbinot, A.; Brussamarello, V. J. (2012), “*Instrumentação e fundamentos de medidas*”, vol. 1, 2ª ed. [Reimpr.], Rio de Janeiro: LTC.
- Bega, E. A.; Delmée, G. J.; Cohn, P. E.; Bulgarelli, R.; Koch, R.; Finkel, V. S. (2011), “*Instrumentação industrial*”, 3ª ed., Rio de Janeiro: Interciência.
- Da Silva, W.B. (2012), “*Aplicação de filtros de partículas para assimilação de dados em problemas de fronteira móvel*”, Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro.
- Dias, A. C. S. R.; Demuner, L.; Rangel, F. D.; Dutra, J. C. S.; Silva, W. B. (2016a), “Online state estimation through particle filter for feedback temperature control”, *XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química*, Fortaleza, Anais do Congresso Brasileiro de Engenharia Química – COBEQ.
- Dias, A. C. S. R.; Dutra, J. C. S.; da Silva, W. B. (2016b), “Simulation and Control of a propylene polymerization reactor with material integration using software EMSO”, *XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química*, Fortaleza, Anais do Congresso Brasileiro de Engenharia Química – COBEQ.
- Doucet, A. (2008), “*On sequential Monte Carlo methods for Bayesian filtering*”, Cambridge University, Cambridge.
- Dutra, J.C.S. (2012), “*Controle de processos baseado em esquemas de reconfiguração*”, Tese de Doutorado, PEQ- COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro.
- Hodouin, D. (2011), “Methods for automatic control, observation, and optimization in mineral processing plants”, *Journal of Process Control*, Québec, v. 21, 211-225.
- Hoffmann, R. X.; Silva, W. B.; Dutra, J. C. S.; Vieira, F. T.; Dias, A. C. S. R. (2016) “Application of state estimation with in chemical reactors”, *XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química*, Fortaleza, Anais do Congresso Brasileiro de Engenharia Química – COBEQ.
- Larsson, T.; Skogestad, S. (2000), “Plantwide control – A review and new design procedure”, *Modeling, Simulation and Control*, v. 21, n. 4, 209-240.
- Nguyen, D.; Gadhamshetty, V.; Nitayavardhana, S.; Khanal, S.K. (2015), “Automatic process control in anaerobic digestion technology: A critical review”, *Bioresource Technology*, Chiang Mai, vol. 193, 513-522.
- Oliver, L. E.; Huang, B.; Craig, I. K. (2012), “Dual particle filters for state and parameter estimation with application to a run-of-mine ore mill”, *Journal of Process Control*, v. 22, p.710-717.
- Prata, D.M.; Lima, E.L., Pinto, J.C (2010), “Simultaneous robust data reconciliation and grosserror detection through particle swarm optimization for an industrial polypropylene reactor”, *Chemical Engineering Science*, Rio de Janeiro, v. 1 65, 4943-4954.
- Sarkar, P.K. (2014), “*Process dynamics and control*”, PHI Learning Private limited.
- Seborg, D. E.; Edgar, T. F.; Mellichamp, D. A. (2004), “*Process dynamic and control*”, 2ªed. [SI]: John Wiley and Sons.
- Skogestad, S. (2000), “Plantwide control: the search for the self-optimizing control structure”. *Journal of Process Control*, v. 10, p. 487-507.
- Skogestad, S. (2004), “Simple analytic rules for model reduction and PID controller tuning”, *Modeling, Simulation and Control*, v. 25, n. 2, 85-120.
- Yang, T.; Laugesen, R. S.; Mehta, P. G; Meyn, S. P. (2016), “Multivariable feedback particle filter”, *Automatica*, v. 71, p. 10-23.